QUÍMICA
BIOLÓGICA
AUTORA
DAYSE DOS SANTOS BASTOS

QUÍMICA BIOLÓGICA

DAYSE DOS SANTOS BASTOS

1ª EDIÇÃO
SESES
RIO DE JANEIRO 2017

Sumário

Prefácio

Prezados(as) alunos(as),

Bem-vindos ao mundo da Química! Você deve ter um nobre motivo para estar matriculado em um curso de graduação que tem como disciplina curricular a Química Biológica. Entretanto, você já parou para pensar por que ou para que estudar química?

As razões são bastante óbvias. Independentemente da profissão que pretenda seguir — biólogo, farmacêutico, biomédico, esteticista, entre outras afins —, a Química estará constantemente presente nas atividades que irá exercer. Além disso, ocupa papel de destaque em vários setores da economia e impacta diariamente a vida de todos nós.

Na área da saúde, de modo bem especial, muitas decisões que precisam ser tomadas em prol da saúde e bem-estar próprias e de outros estão relacionadas à compreensão da ciência e, particularmente, da Química.

A Química aborda mudanças. Nos séculos passados, as observações eram apenas relacionadas à transformação de uma matéria em outra, como madeira em cinzas por exemplo. Atualmente, a Química busca encontrar soluções pela observação da matéria em níveis cada vez menores: atômicos e subatômicos. Por isso, os termos "nanotecnologia" e "química quântica" estão constantemente em foco na comunidade científica e também na mídia.

Mas como estudar e fazer Química? Não é tarefa fácil fazer ciência. Porém, alguns princípios e métodos são comuns à comunidade científica, independentemente da área de conhecimento. Esses princípios e métodos são denominados método científico e envolvem principalmente observações e experimentações.

A Química, como ciência, busca prever e controlar os fenômenos relacionados à matéria e suas transformações. Desta forma, os experimentos têm por objetivo estabelecer generalidades que sejam capazes de auxiliar na previsão de eventos de determinadas situações. Além disso, entendermos de que maneira podemos controlar um processo químico é fundamental e pode nos levar a novas descobertas.

Você já deve ter ideia de que estudar Química é uma atividade desafiadora. Assim, é preciso dedicação e esforço para o real aprendizado. Separe algum tempo e dedique-se ao estudo dessa disciplina. Reflita sobre o conteúdo de forma crítica e procure aplicar o conhecimento no seu dia a dia. Certamente você perceberá o quão útil e prazeroso é aprender e "fazer" Química.

Bons estudos!

1

Fundamentos básicos em química: matéria, energia e medidas

Fundamentos básicos em química: matéria, energia e medidas

Introdução

A Química faz parte das ciências naturais — disciplinas que buscam estudar sistematicamente a natureza. Neste contexto, é a ciência que aborda o estudo da matéria: sua estrutura, propriedades, composição e transformações.

Desta forma, com uma simples reflexão sobre o mundo que nos rodeia podemos perceber a importância e o impacto da Química em nossas vidas. Isto porque o universo da Química abrange tudo o que é considerado material, vivo ou não vivo, vegetal ou mineral, tais como utensílios diversos que facilitam nosso dia a dia, as células que compõem os seres vivos, a comida que nos alimenta e os medicamentos que ingerimos a fim de prevenir, tratar ou amenizar os sintomas e sinais de doenças.

Neste capítulo, apresentaremos a Química em seus diferentes ramos e a importância do conhecimento e aplicação dos seus princípios para a evolução da tecnologia e da sociedade. Além disso, estudaremos os conceitos e princípios relacionados à matéria, suas transformações e a maneira de mensurá-la.

OBJETIVOS

- Identificar o impacto do estudo da Química na tecnologia e na sociedade;
- Reconhecer definições, princípios, leis e classificações relacionadas à matéria e suas transformações;
- Identificar a energia e sua relação com as transformações da matéria;
- Avaliar formas sistemáticas de quantificação das propriedades da matéria e da energia envolvida nesses processos.

A química e a história da humanidade

Podemos afirmar que a Química é a base da vida. Isto porque toda matéria que constitui o universo é composta por elementos químicos e suas combinações. Essas inúmeras combinações podem formar substâncias vitais simples,

como o gás oxigênio, ou moléculas complexas, como proteínas e o DNA (ácido desoxirribonucleico).

As múltiplas interações entre os átomos possibilitam a existência de diferentes substâncias para aplicações, como fármacos, alimentos, produtos de higiene e cosméticos.

Os estudos no campo da Química e suas descobertas permeiam toda a História da humanidade. Mesmo nos primórdios, quando o homem primitivo "descobriu" o fogo, na Idade da Pedra, e passou a usá-lo para cozinhar e se aquecer no frio, ou quando os minerais metálicos passaram a ser transformados em metais, ainda que inconscientemente, já utilizavam os princípios da Química para modificar a matéria. Esses, entre outros eventos, proporcionaram ao homem maior domínio sobre o ambiente à sua volta, possibilitando o surgimento das civilizações.

À medida que as habilidades humanas em transformar a matéria foram aperfeiçoadas, materiais novos, mais sofisticados e eficientes surgiram e transformaram setores fundamentais da sociedade como a agricultura, a medicina, os armamentos e as artes.

Acontecimentos envolvendo processos químicos foram importantes para a História das antigas civilizações, como:

(i) A descoberta da fermentação, que permitiu a produção de cerveja (em 6000 a.C.), do vinho (em 4000 a.C.) e do vinagre;

(ii) A mumificação de cadáveres e a extração e destilação de produtos naturais a partir de plantas pelos egípcios;

(iii) Douração de utensílios de bronze e prata com ouro (700 a.C.).

Em aproximadamente 300 d.C., a alquimia surgiu no Egito e se expandiu pela Europa até 1400 d.C. Os alquimistas eram profundos conhecedores de metalurgia e outras ciências, como a Astronomia e a Química, e buscavam explicações para as transformações sofridas pela matéria.

? CURIOSIDADE

"Transformação" de chumbo em cobre: uma experiência alquimista

Um pedaço de chumbo era colocado em um cadinho feito de ossos calcinados. Após o aquecimento do cadinho no ar, o chumbo fundia-se e sofria oxidação. Como resultado, algumas vezes aparecia prata metálica no fundo do cadinho. Os alquimistas acreditavam que o processo transformava chumbo em prata. Na verdade, o surgimento da prata era decorrente de sua copelação (processo de separação de metais quando ligados entre si), já que é um contaminante natural do chumbo. O aquecimento faz com que o chumbo seja convertido em

óxido de chumbo, um pó fino, semelhante a cinzas. Quando essas cinzas são retiradas, permanece apenas a prata metálica no recipiente.

Mais tarde, no século XIX, a descoberta de um processo para produção maciça do aço a partir do ferro gusa e o desenvolvimento do aço com melhor qualidade possibilitaram a construção de maquinários com maior capacidade de produção, o que favoreceu a Revolução Industrial. A energia proveniente da força muscular deu lugar à energia do vapor.

No século XX, a indústria química sofreu um significativo progresso no desenvolvimento de diversos setores. Os fertilizantes artificiais melhoraram a produção agrícola em grande escala, suprindo a demanda de alimentos da imensa e crescente população mundial. A descoberta de novos fármacos e a formulação de novos medicamentos aumentou a expectativa e a qualidade de vida da população. Além disso, o surgimento de materiais avançados deu suporte para o desenvolvimento dos setores de comunicação (o emprego da fibra ótica, por exemplo) e de transportes (elaboração de materiais mais leves e resistentes).

A Química permanece intimamente relacionada às temáticas fundamentais para a sociedade. Pela sua abrangência e integração com outros ramos da ciência, os "braços" da Química alcançam desde a melhoria da saúde e da qualidade de vida, meio ambiente, alimentos (produção, conservação e controle da qualidade), medicamentos, cosméticos, combustíveis, qualidade da água e do solo, construções, farmoquímicos, entre outros.

Apesar de tradicionalmente a Química ser dividida em três eixos principais (Orgânica, Inorgânica e Físico-Química), outras áreas de estudos ou técnicas especializadas compõem outros ramos da Química, incluindo os apresentados no Quadro 1.

QUÍMICA ORGÂNICA	Estudo dos compostos de carbono
QUÍMICA INORGÂNICA	Estudo de todos os elementos diferentes do carbono e seus compostos
BIOQUÍMICA	Estudos das substâncias, processos e reações biologicamente importantes

QUÍMICA ANALÍTICA	Estudo das técnicas de identificação de substâncias e/ou elementos que constituem a matéria e medição de suas quantidades
QUÍMICA TEÓRICA	Estudo da estrutura molecular e propriedades de substâncias em função dos modelos matemáticos
ENGENHARIA QUÍMICA	Estudo dos processos industriais
QUÍMICA MEDICINAL	Estudo da aplicação da Química no planejamento, desenvolvimento e síntese de novos fármacos
QUÍMICA AMBIENTAL	Estudos dos processos químicos que ocorrem no meio ambiente
QUÍMICA FORENSE	Estudo das aplicações dos princípios e métodos químicos no âmbito judicial e criminal

Quadro 1 - Ramos da Química e seus estudos especializados.

LEITURA

A importância da Química e o desenvolvimento de fármacos

Entre as inúmeras substâncias químicas conhecidas, muitas são capazes de alterar uma função fisiológica com finalidade terapêutica. Essas moléculas são denominadas **fármacos**.

No medicamento, o fármaco é o componente principal e responsável pelo efeito terapêutico e pode ser obtido por isolamento ou extração a partir de fontes vegetais (ex.: ácido salicílico, extraído da casca do salgueiro), animais (ex.: insulina bovina ou suína) ou ainda minerais (ex.: sais de cloreto – cloreto de sódio e potássio).

Os fármacos também podem ser obtidos por via biotecnológica (ex.: vacinas e imunoglobulinas - **biofármacos**), semissintética ou sintética (ex.: atenolol).

Na Antiguidade, o tratamento das doenças se baseava em rituais religiosos, no uso de plantas e outros produtos de origem vegetal, sem nenhum conhecimento de como as substâncias atuavam no organismo para reestabelecer a saúde.

Contudo, os constantes avanços da Química ao longo dos anos possibilitaram aos cientistas o isolamento e a caracterização de inúmeras dessas substâncias. Atualmente, a maior parte dos fármacos é de origem sintética, mas grande parte deles teve como modelo substâncias de origem natural.

A Química continua sendo um pilar no surgimento de novos fármacos. Além da aplicação dos conceitos diretamente na síntese ou isolamento destas substâncias, outros conhecimentos relacionados aos mecanismos de reações químicas e bioquímicas e a métodos analíticos e de identificação rápidos e eficientes têm sido fundamentais nesse processo.

Leia mais: http://ejb-eliezer.blogspot.com.br/. Acesso em 24 de out. 2016.

Matéria e energia

Como discutimos anteriormente, a Química se ocupa de estudar a matéria, suas interações e transformações. Sendo assim, o primeiro passo para aprender Química é entender as definições, classificações e propriedades da matéria e os princípios que regem suas transformações.

A definição mais comum de **matéria** é: qualquer coisa que tenha massa e ocupe lugar no espaço. Sendo assim, pedra, água e até mesmo o ar atmosférico (que não somos capazes de ver a olho nu) são exemplos de matéria, cada um com sua natureza distinta e, consequentemente, propriedades também particulares.

Essa definição pode nos levar a alguns questionamentos:

- Como é possível existirem tantos tipos de matéria diferentes além de diferentes formas da mesma matéria?
- Por que matérias diferentes, como água e etanol, podem ser visualmente semelhantes?
- Quando misturamos sal ou açúcar à água pura, obtemos uma nova matéria?

Foram observações e perguntas como essas que serviram de impulso para aguçar a curiosidade de cientistas ao longo da História e que abriram caminho para grandes descobertas sobre a natureza, as características e propriedades da matéria. Iniciando nossa reflexão sobre esses e outros questionamentos, vamos discutir sobre os tipos de classificação da matéria e suas propriedades físicas e químicas.

Classificação da matéria

A matéria pode ser caracterizada a partir de duas maneiras típicas: pelo **estado físico** ou pela **composição**.

Os **estados da matéria** são caracterizados pelas configurações macroscópicas que a matéria pode assumir. Eles dependem diretamente da velocidade do movimento das moléculas que a constituem.

Estados da matéria

A matéria pode existir, mais comumente, em três estados: gasoso, líquido ou sólido.

Um gás é a forma mais fluida da matéria e capaz de ocupar todo o espaço do recipiente que o contém. Não tem forma nem volume fixos. A mesma quantidade de matéria no estado gasoso pode, então, ocupar um menor espaço, quando comprimida em um recipiente de volume pequeno, ou um espaço maior se estiver acondicionado em um recipiente de grande volume.

Podemos perceber esta propriedade dos gases observando os balões de festa. O gás inserido neles ocupará todo o espaço e tomará a forma definida pelo balão (Figura 1).

Figura 1.1 – O ar ocupa todo o volume, tomando a forma do balão.

Um líquido também é fluido — apresenta a forma do recipiente que o contém e não tem forma definida. Porém, diferentemente dos gases, uma determinada quantidade de matéria mantém o mesmo volume, ainda que em recipientes diferentes.

Sólidos são as formas rígidas da matéria, possuindo volume e forma definidos. Independentemente do recipiente que os contém, os sólidos mantêm sua forma própria definida. É isto que acontece, por exemplo, quando colocamos cubos de gelo dentro de um copo. O gelo é a água em estado sólido e, até que derreta, permanece com a mesma forma e volume.

As propriedades dos estados da matéria podem ser entendidas em nível molecular, a partir da **teoria cinético-molecular**. Segundo essa teoria, qualquer matéria é formada por pequenas partículas — átomos (gases nobres) ou moléculas — que se movimentam constantemente. Nos gases, essas partículas estão bastante afastadas uma das outras e colidem em alta velocidade entre si e contra a parede do recipiente, repetidas vezes. Quanto menor for o recipiente em que o gás estiver contido, menor será o espaço entre as partículas e maior a frequência de colisões entre elas.

Nos líquidos, as moléculas estão compactadas e mais próximas entre si. Ainda assim, movimentam-se rapidamente, deslizando umas sobre as outras — por isso um líquido pode se derramar facilmente.

A forma fixa dos sólidos pode ser interpretada pelo confinamento de suas partículas, que estão bastante próximas entre si e confinadas, geralmente, em um arranjo regular. Essa configuração limita o movimento das partículas às vibrações, em suas próprias posições médias, entrando em contato apenas com outras partículas que as rodeiam.

Outro ponto que precisamos destacar da teoria cinético-molecular é a influência da temperatura e pressão sobre o estado da matéria. Quanto maior a temperatura, a energia das partículas aumenta, assumindo maior velocidade. Essa energia (cinética) é fundamental para que a força de interação entre as partículas seja superada. Quando isto acontece, a matéria passa do estado menos fluido para o mais fluido.

EXEMPLO

Se cubo de gelo é retirado do congelador e deixado em temperatura ambiente, as moléculas de água ganham energia suficiente para se movimentar e se distanciar uma das outras. Com isso, o gelo derrete (funde), e assim passamos a ter água no estado líquido. Ao transferirmos essa água para uma panela e aquecermos, a energia e a velocidade das

moléculas aumentam gradativamente até serem suficientes para romper as forças de interação que as mantêm no estado líquido. Neste momento, podemos observar a formação do vapor (água no estado gasoso). Quanto maior for a intensidade do aquecimento e/ou o tempo, maior será o número de moléculas passando para o estado gasoso, até que não haverá mais água na panela.

Vapor é o termo empregado para indicar a fase gasosa de uma substância que normalmente é encontrada no estado líquido ou sólido da matéria.

Composição da matéria

Se colocarmos em dois copos água pura e água misturada com uma pitada de sal, você é capaz de identificar cada um deles apenas visualmente?

As propriedades dos estados da matéria podem ser identificadas macroscopicamente por nossos sentidos sem o auxílio de quaisquer instrumentos, se tivermos quantidades suficientemente grandes de matéria para serem percebidas. Podemos facilmente identificar que ambos os copos possuem matéria no estado liquido.

Apesar de visualmente idênticos, os copos contêm matérias compostas por partículas diferentes, logo são matérias diferentes.

A classificação da matéria quanto à composição deve ser em nível microscópico, considerando as moléculas, íons ou átomos constituintes e suas propriedades físicas e químicas.

Substância pura

A maior parte das matérias que existem é composta por mais de um tipo de partículas distintas. Porém, se conseguirmos separar esses diferentes tipos de partículas, obteremos substâncias puras.

Cada substância — geralmente chamada apenas de substância — é considerada pura quando em uma amostra só encontramos moléculas daquela substância, sem nenhuma outra presente. Pode existir em mais de uma fase, porém sua composição química é a mesma em todas as fases e possui propriedades particulares pelas quais pode ser identificada. Por exemplo: uma maneira de determinar um

líquido incolor e inodoro como água pura é verificar com cuidado se o seu congelamento/ fusão acontece em 0ºC e a ebulição em 100ºC (a água, no nível do mar, possui pontos de fusão e ebulição bem conhecidos — 0ºC e 100ºC, respectivamente). É importante lembrar que as temperaturas dos pontos de fusão e ebulição sofrem influência da pressão atmosférica.

As substâncias puras podem ser **elementares (simples)** ou **compostas**. As substâncias elementares são aquelas formadas por apenas um tipo de elemento. Sendo assim, não podem ser decompostas em substâncias mais simples. Como exemplos, podemos citar o ferro (Fe), o gás hidrogênio (H_2), o gás hélio (He) e o sódio metálico (Na).

Os elementos são representados por uma abreviação que chamamos de símbolo químico. Esse símbolo consiste em uma ou duas letras retiradas do nome do elemento, sendo a primeira letra sempre maiúscula e a segunda minúscula. Os nomes e os símbolos se originam, principalmente, do inglês, latim e grego. O Quadro 2 traz alguns exemplos de elementos e seus respectivos símbolos químicos e origem.

ELEMENTO	SÍMBOLO	ORIGEM DO SÍMBOLO
Hidrogênio	H_2	Inglês
Hélio	He	Grego (helios = sol)
Cobre	Cu	Latim (cuprum)
Prata	Ag	Latim (argentum)

Quadro 2 - Nome e símbolo químico de alguns elementos químicos.

Os elementos químicos que ainda não foram reconhecidos pela União Internacional de Química Pura e Aplicada – IUPAC recebem nomes provisórios que são escritos com três letras, a primeira maiúscula e as demais minúsculas. Os nomes e símbolos temporários são ununtrium (Uut-113), ununpentium (Uup-115), ununseptium (Uus-117) e ununoctium (Uuo-118).

Atualmente são conhecidos 118 elementos. Nem todos existem na natureza, mas foram produzidos por cientistas, por meio de sofisticadas técnicas da Física moderna.

COMENTÁRIO

Na língua inglesa, a palavra *elements* é usada tanto para definir substâncias elementares quanto para se referir ao termo elemento. Em português, entretanto, substâncias elementares e elementos têm significados distintos. Denominam-se **substâncias elementares** aquelas formadas por **um tipo de elemento químico**. Já **elemento** refere-se a **um tipo de átomo**.

As substâncias compostas (ou apenas compostos) são formadas por mais de um tipo de elemento. O cloreto de sódio (HCl), o etanol (C_2H_6O) e o dióxido de carbono (CO2) são exemplos de compostos.

Da mesma forma que os elementos são representados por símbolos químicos, os compostos são representados por **fórmulas químicas**. Essa representação é a combinação dos símbolos químicos dos elementos constituintes. Caso o composto tenha mais de um átomo do mesmo elemento, esse número recebe o nome de índice e é representado subscrito à direita do símbolo químico desse elemento.

EXEMPLO

Exemplo: cloreto de sódio (NaCl)
Água (H_2O)
Dióxido de carbono (CO2)

Cada composto tem combinação e proporção definida, em massa, dos elementos que o constituem. No caso do etanol, por exemplo, independentemente do tamanho da amostra, sua percentagem em massa é constituída por 13,13% de hidrogênio, 52,14% de carbono e 34,73% de oxigênio. Esses princípios serão estudados com maior profundidade mais adiante.

Os compostos podem ser separados (decompostos) nas substâncias simples dos elementos que os constituem.

EXEMPLO

A água é formada por dois tipos de átomos — hidrogênio e oxigênio. Se passarmos uma corrente elétrica por uma porção de água, pode haver decomposição das moléculas e

formação de duas substâncias simples de cada tipo de átomo. Tanto o oxigênio quanto o hidrogênio, em sua forma pura e elementar, são gases, e à medida que forem formados, bolhas serão desprendidas da água líquida.

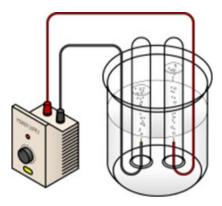



Figura 1.2 – Eletrólise da água.

Misturas homogêneas e heterogêneas

Como mencionamos anteriormente, grande parte da matéria existente é composta por moléculas, íons ou átomos de diferentes tipos de substâncias. Esses tipos da matéria são classificados como **misturas**.

Diferentemente do que acontece nas substâncias puras, os componentes das misturas podem ser separados (purificados) com o uso de técnicas físicas. Muitas vezes, entretanto, são necessárias repetições do mesmo processo, ou deve ser realizado mais de um tipo de processo físico para que as substâncias de uma mistura sejam totalmente separadas. Na indústria farmacêutica, por exemplo, um sistema de purificação de água formado pela combinação de várias técnicas de separação é indispensável para obter água com pureza adequada, para fins farmacêuticos.

As propriedades químicas e físicas de uma mistura são diferentes daquelas que seus componentes puros apresentam e podem variar de acordo com o tipo e quantidade de cada constituinte. Uma mistura de água e sal, por exemplo, pode ter o ponto de congelamento reduzido se adicionarmos mais sal à mistura, e aumentado se acrescentarmos mais água.

Dependendo do número de **fases** que podem ser identificadas macro ou microscopicamente, as misturas são classificadas como **homogêneas** ou **heterogêneas**.

Fase é uma determinada região da matéria cujas propriedades são idênticas em toda sua extensão.

Fonte: Brady

Uma **mistura** é considerada **homogênea** quando tem uma só fase. Ou seja, em qualquer região da mistura a composição e a proporção de cada substância e propriedades são idênticas. As misturas homogêneas são frequentemente chamadas de **soluções** e podem ser sólidas, líquidas ou gasosas.

EXEMPLO

Ar atmosférico, água potável, água com açúcar, soro fisiológico, petróleo e aço.

É importante destacar que misturas homogêneas apresentam apenas uma fase.

Como vimos anteriormente, as misturas possuem propriedades distintas daquelas apresentadas pelos seus componentes puros. Em laboratório, podemos diferenciar substâncias puras de misturas homogêneas investigando essas propriedades.

Nas substâncias puras, por exemplo, a transformação do estado líquido para o gasoso ocorre em uma temperatura fixa, que conhecemos como ponto de ebulição, assim como o ponto de fusão. Já em uma mistura homogênea líquida, a temperatura em que ocorre a ebulição é constante, semelhante às substâncias puras. Contudo a temperatura de fusão é variável, caracterizando uma mistura azeotrópica.

Quando a matéria possui mais de uma fase e aspecto desigual perceptível, é classificada como mistura **heterogênea**.

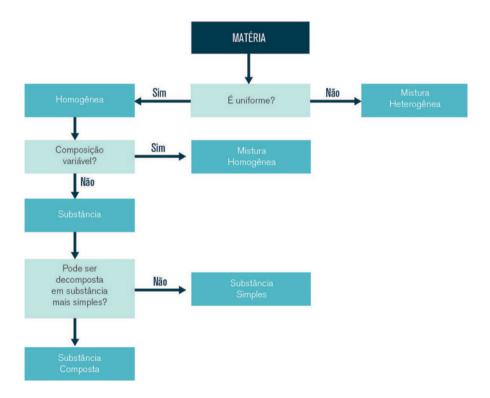
Em alguns casos, a percepção de uma mistura é bastante fácil. As suspensões medicamentosas, por exemplo, são formulações farmacêuticas em que a substância principal, capaz de promover o efeito farmacológico, é insolúvel, e para ser administrada na forma líquida precisa ser suspensa em um veículo líquido. Nestes tipos de medicamentos, conseguimos observar as partículas suspensas a olho nu.

Algumas misturas heterogêneas podem parecer ter apenas uma fase, mas, quando observadas com o auxílio de lupas ou microscópios (ou ultramicroscópios), podemos identificar seus componentes. Isto acontece em **dispersões coloidais**,

como o leite, a maionese e diversos produtos cosméticos (ex.: desodorantes aerossóis, cremes hidratantes, espumas de barbear).

Dispersões coloidais são misturas heterogêneas nas quais as partículas que estão dispersadas são invisíveis (1nm a 100 nm). As partículas dispersadas podem ser formadas por aglomerados de átomos, íons ou moléculas.

O sangue é outro bom exemplo de mistura heterogênea. Apesar da sua aparência uniforme, quando observamos uma amostra ao microscópio conseguimos identificar as células sanguíneas. Uma forma de constatarmos a presença de diversos componentes no sangue é quando o submetemos à centrifugação. Após esse processo, o sangue apresentará três fases diferentes, compostas por hemácias, plaquetas e plasma.

Resumo esquemático para estudo

Assim como cada indivíduo tem características específicas que determinam sua identidade, as substâncias são únicas por apresentar um grupo de propriedades pelas quais podem ser reconhecidas e caracterizadas. Uma bola de metal e outra de isopor, de mesmo tamanho, são nitidamente distintas pela diferença de cor, textura e também pelo peso de cada uma.

Quando uma propriedade pode ser medida sem que haja modificação na identidade da matéria, é classificada como **propriedade física**. A massa ou a temperatura de uma substância são exemplos de propriedades físicas. A razão entre a massa de uma substância e o volume que ocupa (densidade) também pode ser calculada sem que haja mudança no tipo de matéria. Logo, trata-se de uma propriedade física.

A capacidade de a matéria ser transformada em outra é classificada como **propriedade química**. Uma propriedade química do hidrogênio é sua capacidade de reagir com o oxigênio e formar água.

Outra maneira de classificar as propriedades da matéria está relacionada com a dependência ou não da quantidade de substância (tamanho ou extensão da amostra da substância).

Ao separarmos duas amostras de uma mesma substância líquida com diferentes volumes e medirmos suas massas, acharemos resultados diferentes. A amostra com maior volume apresentará maior massa. Isto porque tanto o volume quanto a massa são propriedades que dependem da massa da amostra, sendo classificadas como **propriedades extensivas**.

A propriedade que se mantém inalterada em quaisquer quantidades da substância pura é classificada como **propriedade intensiva, ou seja, não depende da massa da amostra**. Um copo ou uma jarra, sob as mesmas condições de pressão, vaporizam igualmente a temperatura. Logo, a temperatura de vaporização (ebulição) é uma propriedade intensiva.

Em alguns casos, as propriedades intensivas são calculadas a partir de propriedades extensivas. A **densidade** é a razão entre a massa de uma substância (ou objeto) e o volume que ocupa. Ou seja, quanto maior a massa de uma substância em um volume determinado, maior será sua densidade.

A densidade justifica, por exemplo, por que uma bola de ferro pesa mais do que outra, de mesmo tamanho, mas feita de plástico. No Quadro 3, veremos outros exemplos de propriedades intensivas.

PROPRIEDADE	
Ponto de fusão	Temperatura em que a substância passa do estado sólido para o líquido
Ponto de ebulição	Temperatura em que a substância passa do estado líquido para o gasoso
Densidade	Razão entre a massa e o volume de uma determinada quantidade da substância
Solubilidade	Quantidade da substância que pode ser dissolvida em determinado volume de um solvente
Condutividade elétrica	Medida da capacidade de uma substância para conduzir eletricidade

Quadro 3 - Exemplos de propriedades intensivas.

As propriedades de muitas substâncias puras foram determinadas e catalogadas. A importante fonte de referência dessas informações é o Handbook of Chemistry and Physics. Além das propriedades, esta obra traz a nomenclatura oficial da IUPAC (Internacional Union of Pure and Applied Chemistry).

COMPOSTO	PONTO DE FUSÃO (PF)	PONTO DE EBULIÇÃO (PE)	DENSIDADE
Cloreto de sódio	801°C	1413°C	2,16 x 103 kg/m^3
(NaCl)			
Etanol (C2H6O)	-114 °C	78,37 °C	789 kg/m^3
Nitrogênio (N2)	-210 °C	-197,79 ° C	1,2506 kg/m^3

Transformações da matéria

As substâncias podem sofrer mudanças em suas propriedades físicas, sem que sua identidade seja alterada, como, por exemplo, a mudança de estado físico das

substâncias. Essas transformações são chamadas de transformações físicas. Por acontecer em condições bem definidas em substâncias puras, as transformações físicas podem ser utilizadas para sua identificação. Por exemplo: a temperatura em que um determinado tipo de sólido funde (ponto de fusão) será a mesma, desde que esteja puro. As mudanças de estado físico da substância possuem nomes específicos, como mostra o Quadro 4:

TIPO DE TRANSFORMAÇÃO FÍSICA	ESTADO INICIAL	ESTADO FINAL
Fusão	Sólido	Líquido
Ebulição/ vaporização	Líquido	Gasoso
Condensação	Gasoso	Líquido
Solidificação	Líquido	Sólido
Sublimação	Sólido	Gasoso
Ressublimação	Gasoso	Sólido

Quadro 4 - Tipos de transformações físicas da matéria.

As transformações (ou **reações**) químicas são bastante significativas para o estudo da Química. Nesse tipo de transformação, substâncias deixam de existir, enquanto outras novas são produzidas.

As reações químicas são representadas por **equações químicas**. Nelas, as substâncias que sofrem a transformação (**reagentes**) ficam à esquerda, enquanto as substâncias resultantes da reação (**produtos**) ficam à esquerda. Reagentes e produtos são separados nas equações químicas por uma seta, no sentido dos produtos (Figura 4). Nesta figura, hidrogênio e oxigênio são reagentes, enquanto a água é o produto da reação.

$$2H_2 + O_2 \longrightarrow 2H_2O$$

Figura 1.3 – Equação química da reação de formação da água.

Ao longo da História, o estudo de muitas reações químicas mostrou que essas transformações são regidas por alguns princípios, denominados **leis das transformações químicas**.

A primeira delas foi postulada por A.L. Lavoisier, em 1774, e conhecida como lei da conservação das massas. Essa lei determina que, durante uma transformação química, e um sistema fechado, não é medido ganho ou perda de massa. Sendo assim, o somatório das massas dos produtos deve ser igual ao somatório das massas dos reagentes.

EXEMPLO

O ácido carbônico, quando decomposto, produz água e gás carbônico. Se partindo de 5,0g de ácido carbônico são formados 1,45 g de água, qual a massa, em gramas, de monóxido de carbono formado?

Solução:

Pela lei de conservação das massas, não há alteração de massa total. Logo, a soma da massa de água e gás carbônico deve ser igual à massa de ácido carbônico:

Ácido carbônico ⟶ água + gás carbônico

$H_2CO_{3(aq)} \longrightarrow H_2O_{(l)} + CO_{2(g)}$

massa H_2CO_3 = massa H_2O + massa CO_2

massa H_2CO_3= 5,0 g

massa H_2O = 1,45 g

massa CO_2 = ?

massa CO_2 = massa H_2CO_3 – massa H_2O = 5,0 g – 1,45 g = 3,55g

A segunda lei das transformações químicas, formulada por Joseph Louis Proust em 1797, é também conhecida como lei das proporções constantes ou definidas. Segundo esta lei, em um composto cada elemento tem sua proporção em massa, determinada e característica. Por exemplo: a água é formada por dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio e, em uma amostra, independentemente do tamanho, 11,19% da massa total será constituída por hidrogênio e 88,91% por oxigênio.

Mesmo que outra substância seja formada pelos mesmos elementos, como a água oxigenada, por exemplo, as proporções serão diferentes. No caso da água oxigenada, cada molécula é formada por dois hidrogênios e dois oxigênios e as suas proporções são, respectivamente, 5,88% e 94,12%.

Toda transformação que a matéria sofre envolve fundamentalmente a transferência de energia. Para que haja a fusão de um sólido, por exemplo, as moléculas, íons ou átomos da substância precisam absorver energia para que aumente a agitação e as distâncias entre si.

Como podemos definir energia? A definição de **energia** refere-se à medida da habilidade ou capacidade de se produzir trabalho. Por exemplo: ao levantarmos um objeto do chão, realizamos trabalho sobre ele porque o colocamos contra a força da gravidade.

A energia pode ser classificada como **cinética** ou **potencial**. Energia cinética é a que o corpo possui quando está em movimento. Já a energia potencial refere-se à energia que o corpo possui em função da sua posição.

Seguem, no Quadro 5, exemplos de energias cinéticas e potenciais:

ENERGIA CINÉTICA	ENERGIA POTENCIAL
- Energia térmica	- Potencial química
- Mecânica	- Gravitacional
- Elétrica	- Eletrostática
- Potencial	

Quadro 5 - Exemplos de energias cinéticas e potenciais.

Os vários tipos de energia podem ser convertidos uns nos outros, segundo a lei da conservação da energia, ou primeira lei da termodinâmica. De acordo com essa lei, a energia total do universo é constante, ou seja, a energia não pode ser criada ou destruída. Em uma queda d’agua, por exemplo, a energia potencial armazenada da água é convertida em energia cinética, capaz de girar uma turbina e produzir energia elétrica.

Calor e temperatura

Embora calor e temperatura sejam termos com forte relação, precisamos distingui-los de forma clara. Quando verificamos a **temperatura** de uma matéria, estamos

na verdade medindo a energia térmica (energia cinética média das partículas) que ela possui e sua capacidade de transferir calor. O que seria, então, o calor?

O **calor** é uma forma de energia de transferência de um objeto mais quente para outro mais frio. Ele só existe no momento que está sento transferido. Logo, essa energia não está presente nesta forma nem antes nem depois da transferência. Uma matéria que recebe calor aumenta sua energia total. As partículas dessa matéria passam a ter maior energia potencial, maior energia cinética, ou ambas simultaneamente.

É possível que um objeto receba calor e ainda assim a temperatura não seja alterada. Por que isso acontece? Nesses casos, a energia térmica transferida aumenta a energia potencial das partículas, e não a energia cinética. Isto acontece, por exemplo, no ponto de fusão de uma substância pura.

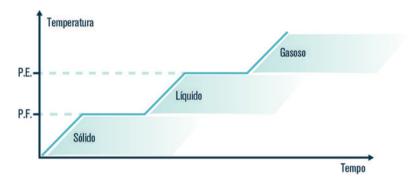



Figura 1.4 – Gráfico ilustrativo do ponto de fusão (P.F.) e do ponto de ebulição (P.E.) de uma substância pura.

A transferência de energia térmica também é importante nas transformações químicas da matéria. Em algumas situações, as reações químicas necessitam de energia térmica para acontecer. Essas reações são chamadas de endotérmicas. Por outro lado, é possível que, ao acontecerem, algumas reações liberem energia térmica para o ambiente. Chamamos esse tipo de reação de **exotérmica**.

RESUMO

Neste capítulo, discutimos a Química como ciência e a sua notória contribuição no desenvolvimento da humanidade, além de sua relação íntima com os eventos marcantes de nossa sociedade.

Aprendemos também que a matéria pode ser classificada, de acordo com o estado físico que apresenta, em sólida, líquida ou gasosa. Podemos também classificá-la segundo sua composição. Uma substância pura apresenta apenas um tipo de partícula, que pode ser formada por um tipo de elemento (substância elementar ou simples) ou por mais de um elemento (substância composta). Se a matéria possui mais de um tipo de partícula, é classificada como mistura. As misturas podem ter uma fase (homogênea) ou mais fases (heterogênea).

Vimos que toda substância possui propriedades físicas e químicas que lhe são específicas e conferem identidade. As propriedades químicas alteram a composição da matéria, dando origem a outras substâncias, enquanto as físicas não alteram sua identidade.

Toda propriedade que independe da quantidade de matéria é denominada propriedade intensiva (ex.: densidade). São importantes para o reconhecimento e determinação de pureza das substâncias. As propriedades extensivas são aquelas que dependem da quantidade de matéria e são comuns a vários tipos de substâncias (ex.: volume e massa).

Observamos que a matéria pode sofrer dois tipos de transformação: física e química. Na transformação física, a identidade da matéria é conservada, havendo apenas a transição do estado físico da matéria. Já na transformação ou reação química, a matéria inicial reage para formar uma nova matéria, com propriedades distintas. Essa transformação, entretanto, é regida por duas leis: lei de conservação das massas e lei da composição definida.

Verificamos também neste capítulo que as transformações da matéria envolvem a transferência de energia. Energia é a medida da capacidade de realizar trabalho. Destacamos que, segundo a lei da conservação de energia, a energia total é sempre constante, ou seja, não é criada nem destruída, mas transformada de um tipo de energia para outro.

Finalizando o capítulo, definimos as diferenças entre calor e temperatura e a relação desses termos com as transformações da matéria.

É bem provável que, após estudar este capítulo, o olhar que você tinha com relação às "coisas" que compõem o mundo a nossa volta tenha mudado e se dado conta que muitos fenômenos que conseguimos perceber com nossos sentidos são resultados de muitos outros, invisíveis. Esses fenômenos acontecem em nível microscópio com a matéria na sua forma mais reduzida: moléculas, íons e átomos.

Como treinamento, observe alguns fatos cotidianos e as matérias que compõem o ambiente em que você vive e procure aplicar o conhecimento trazido neste capítulo. Tente classificá-los e pensar no que pode estar acontecendo no nível microscópico. Certamente assim, os conceitos aqui apresentados serão ainda melhor consolidados neste processo de aprendizagem.

ATIVIDADE

1) Os comprimidos efervescentes são formulações farmacêuticas muito utilizadas principalmente para antiácidos. Ao ser adicionado em um copo de água pura, você percebe a liberação de bolhas de gás. Analisando esta situação, responda as questões abaixo:

a) Qual a classificação da água, quanto a sua composição, antes e depois da adição do comprimido? Justifique.

b) Que tipos de transformações podem estar acontecendo?

2) Uma chaleira com água é colocada no fogo alto durante tempo suficiente para que toda a água seja vaporizada. Em determinado momento, a água começa a ferver, porém a temperatura continua variando. Ao final da evaporação, percebe-se um resíduo sólido no fundo da chaleira. Baseado nesses fatos, podemos afirmar que se trata de água pura? Por quê?

2

Unidades de medidas e operações matemáticas na química

Unidades de medidas e operações matemáticas na química

Introdução

A Química é essencialmente uma ciência de observações e experimentações das mudanças químicas ou físicas da matéria.

Imaginemos que duas soluções foram misturadas em um mesmo recipiente. Imediatamente a mistura esquenta e formam-se pequenas partículas sólidas que, após alguns minutos, decantam e passam a ocupar o fundo do recipiente. Sem qualquer instrumento de medida ou cálculo matemático, observamos que, quando as duas soluções do experimento são misturadas, ocorre uma reação química cujos resultados são a formação de matéria no estado sólido (com cor e aspecto perceptíveis) e liberação de calor. Chamamos essas observações de **qualitativas**.

Entretanto, muitas propriedades da matéria são **quantitativas**, ou seja, estão associadas com números. Por exemplo: para compreendermos melhor o experimento citado, seria necessário saber a quantidade do sólido formado ou qual a quantidade de calor liberado.

Informações numéricas relacionadas com as medidas quantitativas precisam ter as unidades especificadas. Assim, o valor numérico expressará o tamanho da medida corretamente.

Neste capítulo, vamos conhecer as principais unidades de medidas usadas em mensurações científicas e como fazer a conversão entre elas. Também vamos destacar algumas operações matemáticas fundamentais no estudo das ciências naturais, principalmente da Química.

OBJETIVOS

- Reconhecer o Sistema Internacional de Unidades;
- Identificar as principais unidades métricas;
- Relacionar as principais medidas quantitativas no estudo da Química e suas conversões;
- Definir erro experimental, precisão e exatidão;
- Aplicar conceitos matemáticos necessários no estudo da Química.

O sistema internacional de unidades (SI)

Em todas as civilizações, ao longo dos séculos, a necessidade de fazer medições sempre esteve presente. Entretanto, os parâmetros para as medidas eram muito variados. Normalmente eram usadas unidades bastante imprecisas e arbitrárias, baseadas em partes do corpo humano, como, por exemplo, polegadas, pés e palmos. Com o crescente contato comercial, começou a haver muitas divergências, pois as unidades não eram correspondentes entre as regiões. Além de pouco confiáveis, elas eram, muitas vezes, subjetivas.

Assim como a conversão entre as moedas das diferentes regiões, as conversões das unidades de medidas tornaram-se muito importantes. A primeira iniciativa de padronização de um sistema de medidas aconteceu em 1789, na França, e foi denominado Sistema Métrico Decimal. Esse sistema foi baseado em constantes naturais e foi constituído por apenas três grandezas: comprimento (**metro**), volume (**litro**) e massa (**quilograma**).

O metro, segundo o Sistema Métrico Decimal, é definido como: "a décima milionésima parte da quarta parte do meridiano terrestre", ou seja, é o comprimento do meridiano divido por 40.000.000.

Essa definição foi substituída em 1983, na 17ª Conferência Geral de Pesos e Medidas pela seguinte: *metro é o comprimento do trajeto percorrido pela luz no vácuo*, durante um intervalo de tempo de 1/299.792.458 de segundo.

A unidade de medida padronizada para volume — o litro — foi definida como sendo o volume de um decímetro cúbico. Embora até hoje o litro permaneça como a unidade mais usada na rotina dos laboratórios, o metro cúbico é a unidade SI de medida para volume, sendo, por isso, a mais indicada.

Para medir a massa, a unidade estabelecida foi o quilograma, que é definido como a massa de um decímetro cúbico de água na temperatura de maior massa específica, ou seja, a 4,44ºC. Para a materialização dessa unidade, foi criado um cilindro de platina iridiana, que até hoje permanece guardado em um cofre na sede do Bureau International Poids et Mesures, na França.

Vários cientistas ao longo do mundo estudam outras formas de, por meio de constantes físicas, redefinir a unidade quilograma. Isto porque, ao longo dos anos, réplicas construídas do cilindro padrão do quilograma, ainda que preservadas sob condições controladas, tiveram alterações na massa.

LEITURA

Leia o artigo Um quilo de problemas em:

http://www.ipem.sp.gov.br/index.php?option=com_content&view=article&id=1198%3Aum-quilo-de-problemas&catid=67&Itemid=273. Acesso em 25 de out. 2016.

Apesar da simplicidade e coerência do Sistema Métrico Decimal, os avanços científicos exigiram unidades de medidas com maior precisão e variedade. Por isso, em 1960, a Conferência Geral de Pesos e Medidas o substituiu pelo Sistema Internacional de Unidades (SI).

O SI contempla várias grandezas físicas de interesse comercial, industrial e de tudo que possa ser relacionado com ciência de medição. Segundo o SI, são definidas sete unidades básicas (Tabela 1):

GRANDEZA	NOME DA UNIDADE	ABREVIATURA
Massa	Quilograma	kg
Comprimento	Metro	m
Tempo	segundo	s
Temperatura	Kelvin	K
Quantidade de matéria	Mol	mol
Corrente elétrica	ampère	A
Intensidade luminosa	candela	cd

Tabela 1 - Unidades de base do SI.

Outras unidades são obtidas relacionando-se unidades básicas, que são definidas como Unidades SI derivadas. São inúmeras as grandezas exploradas na ciência, e dificilmente conseguiríamos nas páginas deste livro apresentar uma relação completa.

Na Tabela 2, apresentamos alguns exemplos de grandezas derivadas e suas respectivas Unidades SI derivadas:

GRANDEZA DERIVADA	NOME	SÍMBOLO
Área	metro quadrado	m^2
Volume	metro cúbico	m^3
Densidade	quilograma por metro cúbico	kg/m^3
Concentração de quantidade de substância	mol por metro cúbico	mol/m^3
Velocidade	metro por segundo	m/s
Aceleração	metro por segundo ao quadrado	m/s^2
Índice de refração	Um	l

Tabela 2 - Exemplos de unidades SI derivadas expressas a partir das unidades de base.

Algumas vezes precisamos utilizar prefixos que expressam frações decimais ou múltiplos de 10 juntamente com as unidades de medidas. Você já deve ter visto alguns deles. Por exemplo: uma lata de refrigerante geralmente contém 350 mL do produto. O "m" é o símbolo do prefixo *mili*, que representa uma fração de 10^{-3} da unidade litro (L).

Conhecer estes prefixos é fundamental, pois muitas vezes no estudo da Química realizamos experimentos em escalas bastante pequenas. A nanotecnologia, por exemplo, é um ramo científico em expansão e trabalha com a matéria em níveis nanométricos (10^{-9}).

Além disso, muitos medicamentos são formulados com doses pequenas da substância ativa (miligramas ou microgramas, por exemplo). Na Tabela 3 encontramos alguns exemplos de prefixos usados com as unidades SI:

Fator	Nome	Símbolo	Exemplo	Fator	Nome	Símbolo	Exemplo
10^1	deca	da	dam (decâmetro)	10^{-1}	deci	d	dg (decigrama)
10^2	hecto	h	hm (hectômetro)	10^{-2}	centi	c	cg (centigrama)

Fator	Nome	Símbolo	Exemplo	Fator	Nome	Símbolo	Exemplo
10^3	quilo	k	km (quilômetro)	10^{-3}	mili	m	mg (miligrama)
10^6	mega	M	Mm (megâmetro)	10^{-6}	micro	µ	µg (micrograma)
10^9	giga	G	Gm (gigâmetro)	10^{-9}	nano	n	ng (nanograma)
10^{12}	tera	T	Tm (terâmetro)	10^{-12}	pico	p	pg (picograma)
10^{15}	peta	P	Pm (pentâmetro)	10^{-15}	femto	f	fg (femtograma)
10^{18}	exa	E	Em (exâmetro)	10^{-18}	atto	a	ag (attograma)
10^{21}	zetta	Z	Zm (zettâmetro)	10^{-21}	zepto	z	zg (zeptograma)
10^{24}	yotta	Y	Ym (yottametro)	10^{-24}	yocto	y	yg (yoctograma)

Tabela 3 - Prefixos do SI.

EXEMPLO

1- Qual a medida, em grama, das seguintes massas?

a) 2, 236 ng; b) 15,8936 Tg; c) 7,04 x 10-3 pg; d)10 x 10-24 Yg

Solução:

Para definir a massa dos exemplos, vamos relacionar os prefixos de acordo com a Tabela 3. O símbolo que precede a unidade é referente a uma fração decimal ou múltiplo de 10. Para a conversão, devemos multiplicar o valor da medida pelo fator apresentado na Tabela 3, referente a cada prefixo.

a) n é o símbolo do prefixo nano (fator equivalente a 10-9).

Resposta: **2,236 ng = 2,236 x 10-9g**

b) T é o símbolo do prefixo tera (fator equivalente a 1012)

Resposta: **15,8935 Tg = 15,8935 x 2,236 x 10-12g**

c) p é o símbolo do prefixo pico (fator equivalente a 10-12)

Resposta: **7,04 x 10-3 pg = 7,04 x 10-3 x 10-12 g = 7,04 x 10-15 g**

d) Y é o símbolo do prefixo yotta (fator equivalente a 1024)

Resposta: **10 x 10-24 Yg = 10 x 10-24 X 1024 g= 10 g**

EXEMPLO

2- O médico prescreve o uso oral de cápsulas de cloridrato de hidroxizina 12,5 mg, durante 8 dias (uma cápsula, 4 vezes ao dia). Sabendo que serão preparadas exatamente as cápsulas necessárias para o tratamento, qual massa total de cloridrato de hidroxizina, em gramas, deve ser pesada?

Solução:

Primeiramente, precisamos calcular o número total de cápsulas a serem preparadas.

Número de cápsulas por dia = 4 cápsulas

Número de dias de tratamento = 8 dias

Total de cápsulas = 4 x 8 = 32 cápsulas

Se o total de cápsulas que devem ser feitas é de 32, e cada cápsula deve conter 12,5 mg de cloridrato de hidroxina, a massa total da substância que deve ser pesada é calculada pela multiplicação desses dois valores:

12,5 x 32 = 400 mg.

Sabendo que m é o símbolo do prefixo mili (fator 10-3), a massa de cloridrato de hidroxizina, em gramas, é **400 x 10-3 g ou 0,400 g**.

Entre as diversas unidades básicas e derivadas do SI, vamos abordar algumas principais que estão frequentemente envolvidas no estudo dos processos químicos. São elas: temperatura, massa, comprimento, volume e densidade.

Temperatura

Como vimos no capítulo 1, a temperatura é a grandeza física que mede a energia cinética das partículas de um objeto. Podemos também dizer que a temperatura mede a sensação tátil de "quente" ou "frio" da matéria em determinado momento.

Existem três tipos de escalas de temperatura: **Fahrenheit**, **Celsius** e **Kelvin**. Essas duas últimas são as mais utilizadas na ciência. Nos experimentos, as temperaturas são geralmente aferidas com termômetros em escala Celsius. Entretanto,

quando precisamos usar esses dados em cálculos, devemos transpor essas medidas para a escala Kelvin.

A escala Fahrenheit é utilizada praticamente apenas pelos Estados Unidos para medir temperaturas de forma rotineira. Em contrapartida, a escala Celsius é quase uma unanimidade nos demais países do mundo.

Escala Fahrenheit

Desenvolvida pelo alemão Daniel G. Fahrenheit (Figura 1), a escala de Fahrenheit foi criada tendo como ponto fixo baixo (0°F) a temperatura de uma mistura de água, gelo e sal (cloreto de amônio) e, como ponto superior, a temperatura "normal" do corpo humano (96°F), e o espaço entre esses dois pontos foi divido em 100 partes. Definições mais precisas ajustaram, posteriormente, a temperatura "normal" do corpo humano para 98°F.

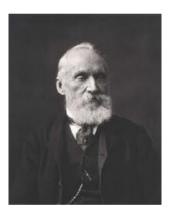



Figura 1 - Retrato de Daniel Fahrenheit (1686-1736).

O congelamento da água acontece a 32°F e a ebulição a 212°F. Esse intervalo é divido em 180 partes, diferentemente das escalas Celsius e Kelvin, cujo intervalo entre fusão e ebulição da água compreende 100 partes iguais.

LEITURA

Para conhecer melhor como foi criada e a importância da escala Fahreinheit, leia o artigo O desenvolvimento histórico da escala Fahrenheit e o imaginário de professores e de estudantes de Física em: https://periodicos.ufsc.br/index.php/fisica/article/view/1082/839. Acesso em 25 de out. 2016.

Escala Celsius

A escala Celsius foi proposta pelo astrônomo Anders Celsius (Figura 2), no século XVIII. Tal escala tem como parâmetros dois pontos fixos: as temperaturas de congelamento e de ebulição da água. O ponto de congelamento foi definido como zero da escala (0ºC), e o ponto de ebulição como 100º da escala, no nível do mar. Como o intervalo contém 100 graduações, essa escala também é conhecida como centígrada.

Figura 2 - Retrato de Anders Celsius (1701-1744).

Exemplos de medidas cotidianas em escala Celsius:

Temperatura normal do corpo humano – 37ºC

Temperatura ambiente confortável – 20ºC

Temperatura ambiente nas CNTP (condições normais de temperatura e pressão) – 25ºC

Temperatura interna máxima que o corpo humano suporta – 42ºC

Escala Kelvin

William Thomson, ou Lord Kelvin (Figura 3), propôs pela primeira vez uma escala de temperatura absoluta, na qual o zero seria a menor temperatura possível de ser atingida — temperatura em que as moléculas têm atividade nula.

Kelvin observou que um gás, ao ser resfriado de 0ºC a -1ºC, perde 1/273,15 de pressão. Desta forma, se a temperatura do gás fosse reduzida a -273,15ºC, a energia cinética de suas moléculas seria igual a zero e, consequentemente, a pressão seria anulada. Como escala absoluta, a proposta por ele não inclui valores negativos. Na prática, essa temperatura nunca foi atingida.

Assim como a escala Celsius, a Kelvin também é dividida em 100 partes. O ponto de congelamento e ebulição da água, em Kelvin, são respectivamente, 273,15 K e 375,15 K.

Observe que não usamos, para medidas de temperatura em Kelvin, o símbolo de grau (º). Isto se explica porque se trata de uma escala absoluta, baseada em princípios termodinâmicos, e não comparações com fenômenos da natureza como as demais escalas.

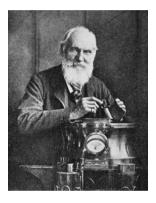



Figura 3 - Retrato de William Thomson, ou Lord Kelvin (1824-1907).

Conversões entre escalas de termométricas

A conversão de uma medida de temperatura entre escalas termométricas é uma prática frequente quando estudamos Química. Como o tamanho e a graduação das escalas são conhecidas (Figura 4), essas conversões são feitas por equações matemáticas.

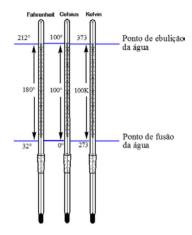



Figura 4 - Ilustração comparativa entre as escalas de Fahrenheit, Celsius e Kelvin (escala absoluta).

Como já vimos, as escalas Celsius e Kelvin são do mesmo tamanho, e ambas dividem-se em 100 partes iguais; por isso a conversão de medidas de temperatura entre elas é bem simples. Como o zero absoluto equivale a -273,15ºC, os cálculos das conversões são feitos pela equação a seguir:

T (K)= ºC + 273,15 [2.1]

EXEMPLO

3- Consideramos 25°C como temperatura ambiente padrão. Em Kelvin, qual é essa temperatura?

Solução: substituindo a temperatura de 25°C na equação **[2.1]**, convertemos esse valor para a escala Kelvin.

T (K) = 25 + 273,15 = 298,15 K [2.1]

Para fazer a transformação inversa, basta subtrair o valor da temperatura em graus Celsius por 275,15, como nesta equação:

T (°C)= T(K) – 273,15 [2.2]

EXEMPLO

4- Em um experimento em laboratório de Química, a temperatura deve estar a 453 K. Se nesse laboratório só encontramos termômetros em escala Celsius, em que temperatura nessa escala o experimento precisa acontecer?

Solução: para convertermos temperaturas da escala Kelvin para Celsius, substitui-se o valor da temperatura em Kelvin na equação **[2.2]**:

T (°C)= 453 – 273,15 = 179,85 °C

Embora não seja usual na maioria dos países, é importante conhecermos as conversões envolvendo a escala Fahrenheit. Para passarmos uma temperatura na escala Fahrenheit para Celsius, usamos a equação **[2.3]** descrita a seguir:

T (°C)= $^5/_9$ [T (°F)-32] [2.3]

EXEMPLO

5- A temperatura corporal é controlada pelo hipotálamo, uma região do encéfalo que funciona como um termostato para manter o organismo com temperatura entre 36°C e 36,7°C. Segundo os infectologistas, chamamos de febre a elevação da temperatura corporal acima dos 37,8°C. Se uma criança apresenta temperatura corporal a 101°F, podemos dizer que ela está com febre?

Solução: o problema indica a temperatura referência para considerarmos o estado de febre em escala Celsius. Precisamos, então, converter a temperatura apresentada pela criança para essa escala, substituindo os valores na equação **[2.3]**:

T (°C)= $^5/_9$ [101 -32]=38,6 °C

De acordo com o resultado, podemos considerar que a criança está com febre, pois o valor encontrado é superior a 37,8°C.

Se o caso for a conversão de graus Fahrenheit para Celsius, a equação matemática é expressa por:

T (°F)= $^9/_5$ T (°C)+32 [2.4]

EXEMPLO

6- A temperatura normal do corpo humano é de 37°C, e em graus Fahrenheit:

T (°F)= $^9/_5$ x 37+32=98,6 °F

A última conversão que vamos abordar é entre as escalas de Fahrenheit e Kelvin. Nessa operação, o valor deve ser transformado primeiro em Celsius e posteriormente para a escala de temperatura final.

Para as conversões, usamos a equação a seguir se desejarmos saber o valor de uma temperatura em graus °F que, inicialmente, está em Kelvin:

$T(°F)=T(K) \times {}^{9}/_{5}-459{,}67$ [2.5]

Da escala Fahrenheit para Kelvin, a equação é:

$T(K)=[T\ (°F)+459{,}67] \times {}^{5}/_{9}$ [2.6]

EXEMPLO

7- O gás hélio ferve a aproximadamente 4,15 K. Calcule essa temperatura em °F.

Solução: vamos apenas substituir o valor da temperatura citada na equação [2.5].

$T(°F)=4{,}15 \times {}^{9}/_{5} - 459{,}67= -452{,}2\ °F$

EXEMPLO

8- A mistura de sal e gelo é muito utilizada em festas para gelar bebidas mais rapidamente. Isto acontece porque a presença do sal faz com que o ponto de congelamento do gelo diminua à temperatura inferior a 32°F. Com 20% de sal, a temperatura de congelamento da água cai para – 3,2°F que, em Kelvin, corresponde a:

Solução: basta substituirmos o valor da temperatura em Fahrenheit na equação **[2.6]**.

$T(K)=[-3{,}2+459{,}67] \times {}^{5}/_{9}=253{,}59\ K$

Comprimento e massa

A massa e o comprimento são grandezas que nos possibilitam mensurar as dimensões físicas de um corpo ou objeto. Ambos podem ser medidos e não dependem das propriedades intensivas da matéria. Por exemplo: matérias com identidades diferentes podem apresentar a mesma massa ou comprimento.

Embora não seja a única grandeza de quantificação de matéria, a massa é a principal. Como já vimos, a unidade SI relativa a essa grandeza é o quilograma (kg).

A massa de um objeto é definida pela comparação com outro(s) objeto(s) de massa conhecida, comumente feita por uma balança.

Em laboratórios de Química, muitas vezes a quantidade de matéria a ser medida é bastante pequena, na escala de miligramas ou microgramas. Para que as determinações dessas massas sejam confiáveis, utilizamos balanças analíticas, também chamadas de balanças de precisão ou balanças químicas (Figura 5), que possuem alta precisão e exatidão nas medidas.

Figura 5 - Balança analítica, de precisão ou química.

Certamente você já ouviu alguém usar o termo "pesagem" para designar a determinação da massa de um objeto usando a balança. Mas precisamos atentar para a diferença que existe no significado das palavras peso e massa.

O peso é uma propriedade que também designa a quantidade de matéria de um objeto. Porém, este termo refere-se à atração gravitacional que a Terra exerce sobre o objeto, que depende da sua massa, da massa da Terra e da distância entre o objeto e o centro da Terra.

Desta forma, um mesmo objeto, quando pesado no Polo Sul e na linha do Equador, não apresentarão pesos iguais, ainda que a massa se mantenha inalterada — o objeto pesará mais no Polo Sul, pois este está mais próximo do centro da Terra.

A unidade padrão SI é o metro. Porém, em Química, muitas vezes trabalhamos com a matéria no nível microscópico, ou seja, com dimensões muito menores que um metro. Geralmente as medidas estão em fatores decimais do metro, como, por exemplo, em centímetros (1 cm = 1 x 10-2 m), milímetros (1 mm = 1 x 10-3 m), nanômetros (1 nm = 1 x 10-9 m) ou picômetros (1 cm = 1 x 10-12 m).

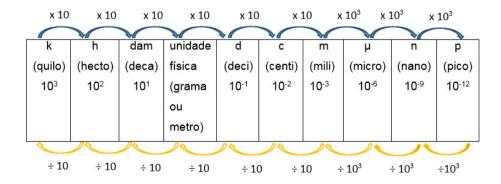
A olho nu, é impossível visualizarmos objetos com tais dimensões. Entretanto, com o auxílio de microscópios especiais, capazes de ampliar imagens milhões de vezes, é possível observar e manejar estruturas extremamente pequenas.

? CURIOSIDADE

Em 2013, os laboratórios da IBM Albaden, na Califórnia, EUA, produziram o filme O menino e seu átomo através da manipulação de átomos. O vídeo foi considerado pelo Guiness World Records o menor filme em stop motion do mundo e está disponível neste link: https://www.youtube.com/watch?v=oSCX78-8-q0. Acesso em 25 de out. 2016.

A nanotecnologia, por exemplo, é um campo da ciência em notável expansão, que se ocupa de manipular átomos individuais e moléculas de até 100nm, com aplicações em sistemas físicos, químicos e biológicos.

Dominar a conversão entre os fatores múltiplos e decimais de unidades de medidas é importante no estudo das ciências naturais. Neste esquema, você pode observar de maneira bastante simplificada como fazer essas conversões:

k (quilo) 10^3	h (hecto) 10^2	dam (deca) 10^1	unidade física (grama ou metro)	d (deci) 10^{-1}	c (centi) 10^{-2}	m (mili) 10^{-3}	μ (micro) 10^{-6}	n (nano) 10^{-9}	p (pico) 10^{-12}

LEITURA

Análise Dimensional

A análise dimensional é uma abordagem interessante de conversão de unidades, em que as unidades das grandezas (gramas, centímetros, mililitros) são tratadas como termos algébricos. A partir disso, podemos cancelar unidades equivalentes. O ponto principal da análise dimensional é saber usar corretamente os fatores de conversão. Esses fatores são frações nas quais o numerador e o denominador são quantidades iguais expressas em unidades diferentes. Por exemplo, a relação entre 1kg e 1000g é:

$$\frac{1kg}{1000g} \quad \text{ou} \quad \frac{1000g}{1kg}$$

Para determinar, por exemplo, quantos gramas existem em 0,0023 kg, multiplicamos o valor a ser convertido pelo fator, em que a unidade desejada fica no numerador. A unidade quilograma (kg) é cancelada e a resposta é, então, expressa em gramas.

$$\text{Número de gramas} = 0{,}0023\ kg \times \frac{1000g}{1kg} = 2{,}3\ g$$

De forma genérica, a conversão de unidades por análise dimensional segue este esquema:

$$\text{Unidade fornecida} \times \frac{\text{unidade desejada}}{\text{unidade fornecida}} = \text{unidade desejada}$$

REFLEXÃO

9- Se a distância entre o átomo de oxigênio e o de hidrogênio na molécula da água é de 95,8 pm, qual é essa distância em nanômetros?

Solução:

A conversão necessária é de um fator menor (10-12) para um fator maior (10-9). Observe que devemos dividir o valor a ser convertido por 1000 (103). Logo, a distância entre os átomos de oxigênio e de hidrogênio na molécula de água é 9,58 x 10-2 nm.

Outra forma útil e igualmente simples de conversão é transformando, consecutivamente, a unidade de informação para metro e para a unidade desejada.

picômetro → metro → nanômetro

$1\ pm = 1 \times 10^{-12}\ m \rightarrow 9{,}58 \times 10^{-11}\ m$

$$95{,}8 \times 10^{-12}\ \cancel{m} \times \frac{1\ nm}{1 \times 10\text{-}9\ \cancel{m}} = 9{,}58 \times 10^{-2}\ nm$$

REFLEXÃO

10- A massa de um átomo de carbono é 1,99 x 10-26 kg. Qual é essa massa em (a) gramas, (b) miligramas e (c) nanogramas?

Solução:

a) Conversão de kg (quilograma) para g (grama)

O prefixo k equivale ao fator 10^3. Logo, 1 kg = 1×10^3 g.

Multiplicando a massa fornecida na questão por esse fator, temos:

$$1{,}99 \times 10^{-26} \times 10^3 = 1{,}99 \times 10^{-23} \text{ g}$$

a) Conversão de g (grama) para mg (miligrama)

$$1{,}99 \times 10^{-23} \cancel{g} \times \frac{1 \, mg}{10^{-3} \cancel{g}} = 1{,}99 \times 10^{-20} \, mg$$

c) Conversão de g (grama) para ng (nanograma)

$$1{,}99 \times 10^{-23} \cancel{g} \times \frac{1 \, ng}{10^{-9} \cancel{g}} = 1{,}99 \times 10^{-14} \, ng$$

Observe que as unidades metro (no exemplo 1) e grama (no exemplo 2) são canceladas, restando no numerador apenas a unidade da resposta final. Esse procedimento é denominado análise dimensional, que trataremos em detalhes mais adiante.

COMENTÁRIO

Apesar de as distâncias moleculares serem dadas, geralmente, em nanômetros ou picômetros, a unidade angstrom (Å) é muitas vezes utilizada em 1 Å = 1×10^{-10} m. Vale destacar que essa não é uma unidade do SI.

Volume

Frequentemente, na rotina de laboratório, utilizamos o volume como unidade de medida para quantificar a matéria no estado líquido. Grande parte das vidrarias de um laboratório é graduada com unidades de volume.

Apesar de a unidade SI padrão de volume ser o metro cúbico, esta não é a unidade utilizada pela maioria das pessoas que lidam com a Química no dia a dia. Em geral, a unidade mais conveniente para usarmos em laboratório é o **litro** (simbolizado por L) e seus fatores decimais, como o mL (mililitro) e o μL (microlitro).

Um litro é definido como o volume ocupado por um cubo com arestas de 1 dm (ou 10 cm), ou seja, equivale a 1 dm^3 (ou 1000 cm^3). Assim, as seguintes relações são possíveis:

1 litro (L) = 1000 mL = 1 dm^3 = 1000 cm^3

1 cm^3 = 1 mL = 0,001 L

Além dos fatores decimais mililitro (mL) e microlitro (μL), o decilitro (que equivale a 0,1 L ou 100 mL) é bastante usado em exames clínicos e toxicológicos para determinar a massa de determinados analitos. Por exemplo: os efeitos tóxicos do AAS (ácido acetilsalicílico – fármaco anti-inflamatório e analgésico) só são observados a partir de níveis séricos superiores a 30mg/dL.

11- Uma pipeta graduada em mL será usada para transferir 1,5 cm3. Qual volume deve ser transferido em: (a) mililitros, (b) litros e (c) decilitros?

Solução:

(a) Conversão de cm^3 em mL

Como 1 cm^3 = 1 mL, a relação entre as unidades é direta. Sendo assim, 1,5 cm^3 = 1,5 mL.

(b) Conversão de cm3 em L

Sabendo que 1L = 1000 cm^3 e usando a análise dimensional, temos:

$$1{,}5\ \cancel{cm^3} \times \frac{1L}{1000\ \cancel{cm^3}} = 1{,}5 \times 10^{-3}\ L$$

(c) Conversão de cm^3 em dL

Assim como no item b, usamos a análise dimensional e a relação de equivalência entre as unidades.

1 dL = 100 cm^3

$$1{,}5\ \cancel{cm^3} \times \frac{1L}{100\ \cancel{cm^3}} = 1{,}5 \times 10^{-2}\ dL$$

Densidade

A densidade é uma grandeza física característica para cada substância e frequentemente usada para identificação. É definida como a massa da unidade de volume de uma substância. Simplificando, é a razão entre a massa de uma matéria e o volume que ocupa. Matematicamente, a densidade pode ser expressa pela seguinte equação:

$$densidade = \frac{massa}{volume} \qquad [2.7]$$

Apesar de o SI considerar como unidade padrão a razão entre quilograma e metros cúbicos (kg/m^3), a densidade é comumente expressa em gramas por mililitro (g/mL) ou gramas por centímetro cúbico (g/cm^3).

Como as substâncias mudam de volume com a variação de temperatura, a densidade é dependente da temperatura. Geralmente, se não é fornecida nenhuma informação sobre a temperatura, assume-se a densidade referente a 25°C (temperatura ambiente padrão).

Na Tabela 4 a seguir, são apresentadas as densidades de algumas substâncias.

SUBSTÂNCIA	DENSIDADE (G/CM3)
Água (25°C)	0,99707
Gelo (0°C)	0,917
Etilenoglicol	1,11
Etanol	0,79
Ferro	7,9
Ouro	19,32

Tabela 4 - Densidades de algumas substâncias.

Nas misturas, as substâncias de maior densidade tendem a ficar abaixo das substâncias de menor densidade. Observe na tabela que a água na forma de gelo tem densidade menor que a água a 25°C. Isto justifica por que o gelo flutua na água.

Vimos que a densidade relaciona a massa e o volume de uma substância. A partir dessa relação, quando temos informações sobre duas dessas grandezas, é possível determinar a terceira.

EXEMPLO

12- Uma bilha de ferro (d= 7,92 g/cm³), de massa desconhecida, foi adicionada a uma proveta contendo água. Após a adição do metal, observamos que a marcação da água aumentou em 1,26 cm³. Considerando que a variação de nível é decorrente do volume ocupado pela bilha, calcule sua massa.

Solução:

O problema nos fornece informações sobre a densidade do ferro e o volume que o objeto ocupa. Assim, basta substituirmos os valores informados na fórmula matemática da densidade **[2.7]** e determinaremos a massa.

$$7{,}92 = \frac{massa}{1{,}26}$$

$$massa = 7{,}92 \times 1{,}26 = \mathbf{9{,}98\ g}$$

Precisão, exatidão e erros experimentais

No âmbito científico, existem duas possibilidades de números: exatos (quando conhecemos exatamente o valor numérico) e não exatos (quando existem incertezas associadas com o número).

Ao dizermos que uma dúzia de ovos contém 12 unidades ou que 1 kg de matéria equivale a 1000 g, estamos nos referindo a números exatos. Entretanto, os números obtidos por medições sempre são afetados por incertezas.

Imagine que várias pessoas verifiquem a massa de um mesmo objeto em determinada balança analítica. Certamente os valores serão diferentes para cada uma das medidas. Isto acontece porque existem erros inerentes ao equipamento (neste caso, à balança) e diferenças em como cada um dos indivíduos realiza o procedimento (erros humanos).

As incertezas relacionadas às medidas quantitativas afetam diretamente a **precisão** e a **exatidão** (ou **acurácia**). Esses termos indicam o quão confiável é uma medida quantitativa.

A **precisão** é a concordância, ou proximidade, entre diferentes medidas de uma mesma quantidade de matéria, ou seja, indica a reprodutibilidade do valor medido. Chamamos de medidas precisas aquelas que, quando repetidas, fornecem resultados iguais ou muito próximos. Não necessariamente esses resultados estarão próximos a um valor dito como real ou referencial.

A **exatidão**, por outro lado, não depende da proximidade das medidas entre si. Valores exatos são aqueles que estão em concordância com um valor real ou o valor de um modelo de referência.

Precisão e exatidão são parâmetros independentes. Uma série de dardos lançados contra um alvo exemplifica as diferenças entre esses conceitos (veja a Figura 5). Nas situações em que os dardos estão próximos entre si, temos alta precisão (figuras 5.B e 5.D), e naquelas em que os dardos estão próximos ao alvo, temos alta exatidão (figuras 5.C e 5.D). Como não são interdependentes, em algumas situações um dos parâmetros é bom e o outro é ruim (figuras 5.B e 5.C).

Os resultados esperados tanto no lançamento de dardos como em procedimentos experimentais é que tenhamos elevada precisão e exatidão (a situação ideal é ilustrada na figura 5.D).

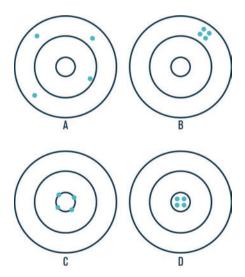



Figura 5 - Ilustração de precisão e exatidão. A. Precisão e exatidão ruins; B. Boa precisão e exatidão ruim; C. Boa exatidão e boa precisão; D. Elevada precisão e exatidão.

Em laboratório, frequentemente as medidas quantitativas são feitas mais de uma vez (replicatas) e, a partir dos resultados, é calculado um valor médio.

Numericamente, a precisão de um conjunto de medidas repetidas é avaliada pelo desvio padrão: quanto menor o **desvio padrão**, menor a dispersão entre as medidas e, consequentemente, maior é a precisão.

Noções matemáticas na química

Algarismos significativos

A precisão de um número é devidamente expressa com uma quantidade de **algarismos significativos** que representem sua incerteza relativa. Imagine, por exemplo, que a massa de um objeto é determinada em uma balança analítica com capacidade de medir 0,00001g e 1,23456 g.

Essa informação deve ser reportada como 1,23456 ± 0,00001g. O símbolo ± (mais ou menos) indica que a massa determinada pode variar **mais** 0,00001g ou **menos** 0,00001g e exprime a **incerteza** da medida. O último algarismo, aquele mais à direita, representa a incerteza ou dúvida.

Quando se trata de medidas quantitativas, todos os algarismos, inclusive aquele referente à incerteza, são considerados significativos. O maior número de algarismos significativos decimais amplia a precisão da medida. No exemplo anterior, o valor 1,23456 g apresenta maior precisão do que se a medida for representada como 1,23 g.

Algarismos significativos são dígitos que determinam o valor (ou tamanho) do número, independentemente da quantidade de casas decimais, e indica a precisão de uma medida quantitativa.

Determinando a quantidade de algarismos significativos de um número, a leitura deve ser feita a partir do primeiro algarismo à esquerda, diferente de zero. Observe alguns exemplos na Tabela 5:

NÚMERO	QUANTIDADE DE ALGARISMOS SIGNIFICATIVOS
4	1
4,1	2
4,12	3
4,1256	5
4,10001	6
421	3

Tabela 5.

No caso de números apresentados como notação científica, todos os algarismos representados no coeficiente são significativos. Por exemplo:

NÚMERO	QUANTIDADE DE ALGARISMOS SIGNIFICATIVOS
$6,2 \times 10^{-2}$	2
$1,09 \times 10^{-4}$	3
$3,00003 \times 10^{-1}$	6

O zero pode ou não ser significativo. Em algumas situações, serve apenas para posicionar a vírgula, ficando à sua esquerda. Em contrapartida, quando são terminais, após a vírgula, ou no meio do número, o zero é significativo. Veja alguns exemplos:

NÚMERO	QUANTIDADE DE ALGARISMOS SIGNIFICATIVOS
3,2500	5
0,0025	2

NÚMERO	QUANTIDADE DE ALGARISMOS SIGNIFICATIVOS
1,002	4
00,0070	2

Um dilema surge quando o zero terminal não vem depois da vírgula, como por exemplo, 120000. Normalmente, nesses casos, a quantidade de algarismos significativos dependerá da aproximação da medida. Por exemplo: se a aproximação é expressa até mil, o número terá três algarismos significativos. No caso da aproximação até cem, a medida terá 4 algarismos significativos.

Como resolução para problemas desse tipo, frequentemente expressamos o número em notação científica, como mostram os exemplos da Tabela 6.

NÚMERO	QUANTIDADE DE ALGARISMOS SIGNIFICATIVOS
$1{,}2 \times 10^5$	2
$1{,}20 \times 10^5$	3
$1{,}200 \times 10^5$	4
$1{,}2000 \times 10^5$	5

Tabela 6.

Precisão em operações matemáticas: algarismos significativos em cálculos aritméticos

Quando realizamos operações matemáticas, é muito importante explicitar os resultados com o número correto de algarismos significativos. Isto indica a precisão adequada do valor calculado. A quantidade certa de algarismos significativos que os resultados numéricos devem ter é determinada por regras aplicadas às operações de adição/ subtração e multiplicação/ divisão.

Arredondamento

Antes de estudarmos as aplicações dessas regras, precisamos saber as formas corretas de reduzir adequadamente a quantidade de algarismos significativos de número. Essa redução é feita obedecendo às seguintes regras de arredondamento:

a) Se o algarismo a ser **mantido** for seguido de um algarismo **maior** que 5, ou igual a cinco e seguido de um dígito diferente de zero, acrescentamos uma unidade ao algarismo mantido e eliminamos os demais.

EXEMPLO

Arredondando o número 3,568 para 2 algarismos significativos: **3,6**.

Arredondando o número 4,751 para 2 algarismos significativos: **4,8**.

b) O algarismo a ser mantido **não** muda se for seguido de um algarismo **menor** que 5.

EXEMPLO

Arredondando o número 1,3427 para 3 algarismos significativos: **1,34**.

c) Se o algarismo a ser mantido for **ímpar** e seguido do número 5 e posteriormente por zeros, ou for o último algarismo, acrescentamos uma unidade ao algarismo mantido.

EXEMPLO

Arredondamento do número 9,463500 para 5 algarismos significativos: 9,4634.

Arredondamento do número 25,55 para 3 algarismos significativos: 25,6.

d) O algarismo a ser mantido não muda se for **par** e anteceder o número 5 e posteriormente seguido de zeros, ou se o número 5 for o último algarismo.

EXEMPLO

Arredondamento do número 10,04500 para 4 algarismos significativos: 10,04.
Arredondamento do número 6,365 para 3 algarismos significativos: 6,36.

Adição e subtração

Segundo a regra da adição/ subtração, a quantidade de algarismos à direita da vírgula no resultado deve ser equivalente à quantidade de algarismos do número somado ou diminuído com menos algarismos.

EXEMPLO

12- Duas amostras distintas (amostra A e amostra B) de uma mesma substância tiveram suas massas determinadas em balanças com precisão diferente. A massa da amostra A foi determinada em uma balança de menor precisão e a da amostra B foi determinada em uma balança analítica. Sabendo que os resultados encontrados para as amostras A e B foram, respectivamente, 22,34 g e 2,2345 g, qual a massa total das duas amostras?

Solução: a adição das duas medidas resulta em um número com 6 algarismos significativos.
2,2345 g+ 22,34 g= 24,5745 g

Entre os números participantes da adição, o de menos algarismos após é o 22,34, que tem 2 algarismos decimais. Sendo assim, o resultado também terá 2 algarismos à direita da vírgula. O resultado com a quantidade adequada de algarismos significativos é 24,57 g.

Multiplicação e divisão

A regra utilizada para operações de multiplicação e divisão difere da aplicada para adições e subtrações.

A quantidade de algarismos significativos do resultado por multiplicação ou divisão deve ser igual ao menor número de algarismos significativos dos termos da operação.

EXEMPLO

1,4760 x 3,2 = 4,7

O resultado apresenta dois algarismos significativos, pois acompanha o segundo termo que tem menos dígitos (o número 3,2). A seguir, observe outros exemplos onde essa regra é aplicada.

Exemplo:

$$\frac{1,563}{0,643} = 2,43$$

O divisor é o termo do cálculo com o menor número de algarismos significativos (possui 3 algarismos: 6, 4 e 3). O resultado também será expresso com 3 dígitos significativos. A regra também se aplica a operações com números em notação científica.

EXEMPLO

$(1,5 \times 10^{-2}) \times 3,374 = 5,1 \times 10^{-2}$

Solução:

A notação científica é o termo que possui o menor número de algarismos significativos (1 e 5). O resultado, que também é expresso em notação científica, terá dois algarismos significativos.

EXEMPLO

$$\frac{2,64 \times (1,8 \times 10^{-12})}{1,495 \times (3,67 \times 10^{-8})} = 8,7 \times 10\text{-}5$$

COMENTÁRIO

O arredondamento deve ser feito em uma etapa, eliminando o número que vem imediatamente após o último algarismo que será mantido. O arredondamento por etapa pode gerar resultados equivocados. Por exemplo: se o arredondamento do número 5,4587 para 1 algarismo significativo for feito em partes, por arredondamentos sucessivos, o resultado final será 6 (5,4587 → 5,459 → 5,46 → 5,5 → 6). No entanto, o número 5,4587 é mais próximo do 5, e não do 6.

ATIVIDADE

A dipirona sódica é uma substância utilizada no tratamento de quadros clínicos febris e também como analgésico. Na forma injetável, a solução de dipirona possui densidade igual a 1,1958 g/cm^3. Suponha que um indivíduo com febre de 39,74°C chegou à emergência de um hospital e, para diminuir sua temperatura corporal, o médico prescreveu 1.000g de dipirona sódica injetável. Responda as questões abaixo:

a) Faça a conversão da unidade de densidade informada para a unidade SI.

b) Quantos mL de solução devem ser injetados no indivíduo? Considere que a seringa usada possui graduação de apenas uma casa decimal e faça o arredondamento adequado (o último algarismo significativo a ser mantido será o primeiro dígito após a vírgula).

c) Alguns minutos após a administração da dipirona, a temperatura diminuiu 2,0°C. Se o único termômetro disponível para aferir a temperatura está na escala Fahrenheit, qual a temperatura verificada antes e depois da medicação?

REFLEXÃO

Neste capítulo, pudemos conhecer o Sistema Internacional de unidades, sua origem, importância e modificações que aconteceram ao longo das décadas, a fim de padronizar a forma como medimos as propriedades extensivas da matéria (as grandezas) na ciência. Além de unidades básicas e derivadas SI, vimos a necessidade de identificar prefixos e símbolos que indicam fatores de conversão decimais ou múltiplos de 10.

Abordamos grandezas fundamentais no estudo qualitativo e quantitativo da matéria: temperatura, massa, comprimento, volume e densidade. Para cada uma dessas grandezas, apresentamos as principais unidades e como realizar as conversões entre elas.

Definimos o que é a precisão e a exatidão de medidas. Aprendemos como apresentar resultados numéricos confiáveis e que representem adequadamente a exatidão e precisão das medidas, aplicando regras matemáticas para determinar corretamente o número de algarismos significativos e arredondamentos.

Assim, enfatizando que a Química é uma ciência essencialmente experimental, é importante sabermos mensurar e apresentar corretamente os resultados, a fim de chegarmos a conclusões verdadeiras sobre os fenômenos químicos.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ATKINS, P.W; JONES, L. **Princípios de Química:** questionando a vida e o meio ambiente. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

AXT, R.; BRUCKMANN, M. E. O conceito de calor nos livros de Ciências. **Cad. Cat. Ens. Fis.** Florianópolis: v. 6, n. 2, p. 128-142, 1989.

BRADY J. E.; HUMISTON, G.E. **Química Geral.** 2. Ed. Vol. 1. Livros Técnicos e Científicos, RJ, 1986.

BROWN, T L.; H. E.; BURSTEN, B. E; BURDGE, J. R. **Química, a ciência central.** 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

INMETRO. **SISTEMA Internacional de Unidades: SI.** 9. ed. (rev.) Rio de Janeiro, 2012.

KOTZ, J. C.; TREICHEL, P.M.; WEAVER, G.C. **Química e Reações Químicas.** 6. ed. Vol. 1. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

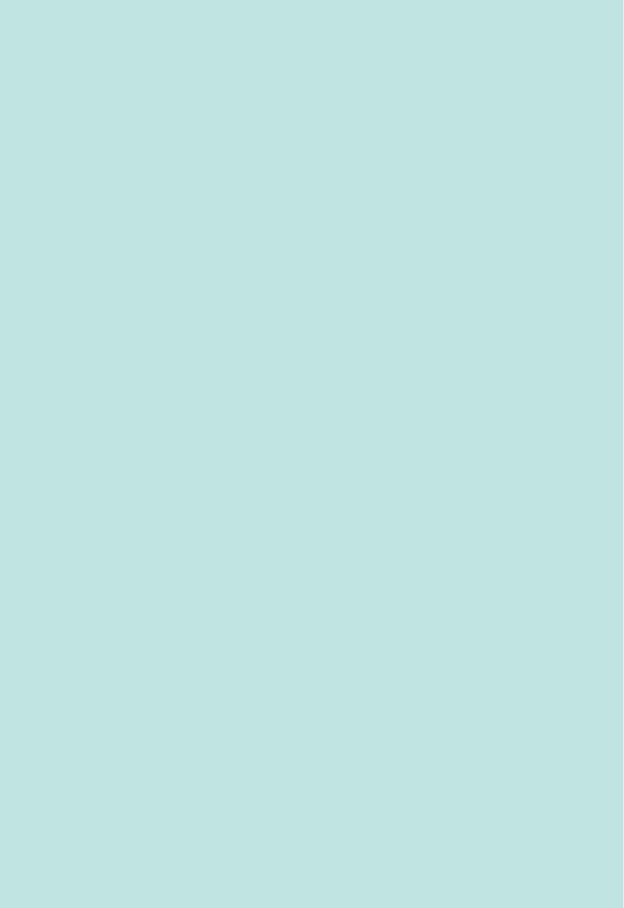
LIMA Jr., P. et al. **O laboratório de mecânica.** Porto Alegre: IF-UFRGS, 2012.

MEDEIROS, A. O desenvolvimento histórico da escala Fahrenheit e o imaginário de professores e de estudantes de Física. **Cad. Bras. Ens. Fís.**, v. 24, n. 2: p. 155-173, ago. 2007.

PIRES, D.P. et al. **Do Termoscópio ao Termômetro Digital:** quatro séculos de termometria. Química Nova, vol. 29, n°6, 2006.

RUSSEL, J. B. **Química Geral.** 2. ed. Vol. 1. São Paulo: Makron Books, 1994.

SILVA, JR; GOMES, D.; VELOSO, C.R.; SANTOS, J. A. Comparação da Estabilidade da dipirona sódica em solução oral em frasco de vidro e polietileno. **Ensaio e Ciências** – Ciências Agrárias, Biológicas e da Saúde, vol.14, n° 6, 2011.

TOMA, H. E. A Nanotecnologia das Moléculas. Química Nova na Escola, n° 21, 2005.

Teoria atômica

Teoria atômica

Introdução

Como vimos nos capítulos anteriores, a matéria é formada por substâncias químicas. Mas o que faz as substâncias serem diferentes umas das outras?

Sabemos que, fundamentalmente, toda substância é composta pela combinação de um ou mais tipos de elementos químicos. Isto significa que, se toda matéria é constituída por substâncias, e estas são formadas pela combinação entre elementos químicos, a origem da diferença e complexidade da matéria reside nas características dos átomos que as constituem.

Se já chegamos a essa conclusão, você pode estar perguntando o que faz um átomo ser diferente do outro. Será que existe algo em comum entre os diferentes tipos de átomos?

Neste capítulo, vamos conhecer a estrutura do átomo e entender como é possível caracterizar um elemento químico. Iniciaremos também a reflexão sobre a influência da estrutura dos átomos na formação das substâncias químicas.

OBJETIVOS

- Estabelecer as teorias atômicas;
- Descrever a estrutura do átomo moderno e suas partículas fundamentais;
- Definir número e massa atômica, número de massa e isótopos;
- Definir os números quânticos, orbitais atômicos e distribuição eletrônica.

Teorias atômicas da matéria

Um breve histórico sobre os elementos químicos

Ao longo da História, o homem sempre buscou compreender a constituição das coisas. Por muitos séculos, acreditava-se que a matéria era resultado de um poder mágico ou sobrenatural.

As primeiras ideias racionais a respeito da constituição da matéria foram propostas na Grécia pelos filósofos pré-socráticos e, posteriormente registradas por

Aristóteles. Na procura de unidades simples que combinadas pudessem originar matérias mais complexas, os filósofos gregos definiram quatro elementos básicos (Figura 1 – Elementos). Essa ideia persistiu até a Idade Média e foi usada como princípio para diversas teorias na Medicina e na alquimia, entre outros.

? CURIOSIDADE

Teoria humoral de pitágoras

Os filósofos gregos imaginavam o universo formado por quatro elementos — terra, ar, fogo e água, dotados de qualidades opostas: quente e frio, seco e úmido. Esta concepção foi transportada para o campo das ciências médicas e biológicas deu origem ao conceito dos quatro humores: o sangue, a fleuma, bile amarela e bile negra. Em estado saudável, esses humores estariam em proporção harmônica. Já o processo de doença seria causado pelo excesso ou falta de um dos humores, ou em mistura desarmônica.

Segundo a doutrina dos quatro humores, o sangue é armazenado no fígado e levado ao coração, onde se aquece, sendo considerado quente e úmido; a fleuma, que compreende todas as secreções mucosas, provém do cérebro e é fria e úmida por natureza; a bile amarela é secretada pelo fígado e é quente e seca, enquanto a bile negra é produzida no baço e no estômago e tem natureza fria e seca.

A doutrina dos quatro humores encaixava-se perfeitamente na concepção filosófica da estrutura do universo. Estabeleceu-se uma correspondência entre os quatro humores com os quatro elementos (terra, ar, fogo e água), com as qualidades (frio, quente, seco e úmido) e com as estações do ano (inverno, primavera, verão e outono).

(Fonte: REZENDE, JM. **À sombra do plátano:** crônicas de história da medicina. São Paulo: Editora Unifesp, 2009. Dos quatro humores às quatro bases. pp. 49-53.)

Diferentemente de hoje em dia, quando sabemos que os elementos químicos são unidades fundamentais cujas combinações dão origem a toda matéria existente, a teoria dos quatro elementos proposta pelos gregos tratava-se apenas de um modelo conveniente para explicar a existência e os fenômenos relacionados à matéria.

Considerando que as teorias baseadas nos quatros elementos fundamentais eram insuficientes para justificar a complexidade e diversidade do mundo, o filósofo Leucipo de Abdera (500 - 450 a.C.) sugeriu que toda matéria seria formada por partículas indivisíveis, que chamou de **átomos** (do grego a - negação, tomo – parte). Para Leucipo, o mundo é formado pelos átomos e o vazio. Segundo sua teoria:

- Os átomos são extremamente pequenos e, por isso, impossíveis de ser divididos;
- Quando combinados, os átomos dariam origem uma infinidade de substâncias com diferentes formas;
- Os átomos seriam a menor porção de matéria existente na natureza;
- O átomo seria imutável, porém combinações distintas de um mesmo conjunto de átomos poderiam originar várias formas da matéria.

Conhecido como formulador das ideias de Leucipo, Demócrito (~460 - 370 a.C.) acreditava que na natureza nada pode ser criado do nada e nada pode ser destruído para o nada. Esta afirmativa foi mais tarde reforçada por Lavoisier, quando postulou a lei de conservação das massas (vide capítulo 1). Segundo ele, os átomos também eram inquebráveis, possuíam massa e compunham todos os corpos, tendo cada um seu tipo determinado de átomo.

Os pensamentos de Leucipo e Demócrito eram questionados por muitos filósofos da época, incluindo Aristóteles, por enfatizar apenas o caráter material dos corpos. Para Aristóteles, a matéria também seria constituída por atributos imateriais.

Essas propriedades exerceriam forte influência nas propriedades, funções e capacidades dos corpos, consideradas por ele as mais importantes diferenças entre os corpos. Ainda não era possível explicar, a partir da teoria atômica de Leucipo e Demócrito, as mudanças nas substâncias.

O atomismo passou a ser tema de grande importância durante a Revolução Científica, a partir do século XVI. O cientista irlandês Robert Boyle (1627-1691) buscou associar os princípios do atomismo grego com experimentos, a fim de mostrar que a matéria não pode ser constituída pelos quatro elementos clássicos.

Nessa abordagem, Boyle cria a hipótese de que a matéria é formada por átomos, em diferentes combinações e em movimento. As mudanças nas substâncias seriam resultantes das colisões entre essas partículas. Também defendeu que a Química deveria ser considerada uma ciência e que toda teoria só deveria ser considerada verdadeira quando comprovada experimentalmente.

Entre os séculos XVI e XVII, as descobertas de importantes cientistas mostraram que a matéria seria formada por unidades elementares (os elementos químicos) diferentes dos quatro elementos propostos pelos gregos na Antiguidade. Veja algumas dessas importantes realizações na Tabela 1.

ANO	CIENTISTA	DESCOBERTA/ REALIZAÇÃO
1785	Antoine-Laurent de Lavoisier	Provou que o ar é formado pelos elementos oxigênio e azoto e que a água pode ser decomposta em hidrogênio e oxigênio
1789	Antoine-Laurent de Lavoisier	Organização da primeira lista de elementos, composta por 33 elementos (substâncias simples)
1806	Joseph Proust	Lei das Proporções Definidas
1818	Jöns Jakob Berzelius	Descoberta de novos elementos e medida de massa relativa de 45 elementos
1869	Dmitri Mendeleev	Mediu propriedades químicas dos elementos conhecidos e os organizou na forma de tabela

Tabela 1 - Realizações relacionadas à composição elementar da matéria.

Modelos atômicos

A partir do século XIX, a ideia de que existem diferenças entre os tipos de elementos e, consequentemente, entre os tipos de matéria por eles formada, já era bastante difundido pela comunidade científica. Neste contexto, **modelos** que buscavam explicar a estrutura e o comportamento dos átomos foram elaborados por importantes cientistas. Mas o que seria o modelo de um átomo?

Um modelo é uma representação, ou desenho, de algo a ser reproduzido. No caso dos átomos, os modelos foram criados a partir de experimentos, visando

explicar seus resultados e fazer previsões. Conforme novos experimentos e descobertas surgiram, modelos atômicos mais complexos e detalhados foram propostos.

Modelo atômico de dalton

John Dalton (1766-1844) era químico e meteorologista. Nascido na Inglaterra, foi educado como membro da **Sociedade dos Amigos** e aos doze anos começou a lecionar. Nesta época, também iniciou a leitura de livros que abordavam a divulgação das teorias newtonianas.

Desde cedo, Dalton criou o hábito de registrar de modo sistemático os fenômenos atmosféricos. Este interesse o levou a buscar respostas para diversas questões relacionadas à constituição da atmosfera e às propriedades de seus componentes por meio de experimentos com gases.

Utilizando como base a teoria corpuscular de Newton, Dalton formulou uma Lei a fim de explicar o comportamento dos gases. Esta lei ficou conhecida como Lei de Dalton das Pressões Parciais.

Dalton acreditava nas leis da conservação de massas e das proporções definidas. Creia ainda que os átomos combinados originavam a matéria e eram responsáveis por suas propriedades macroscópicas. Assim, propôs uma teoria que pudesse justificar a organização da matéria. A **teoria atômica de Dalton** tem como postulados:

- Toda matéria é constituída por partículas fundamentais — **os átomos**;
- Os átomos são indivisíveis e permanentes. Não podem ser criados nem destruídos;
- Átomos de um mesmo elemento são idênticos. Diferentes elementos apresentam átomos com massas e propriedades distintas;
- Os compostos químicos são formados de átomos de um ou mais elementos. Um dado composto terá sempre o mesmo número relativo de tipos de átomos.

Muito dos postulados deixados por Dalton ainda é aceito. Entretanto, hoje sabemos que os átomos são formados por partículas menores e que podem ter diferentes massas mesmo sendo do mesmo elemento (os chamados isótopos, que veremos mais adiante).

A teoria de Dalton tentou também justificar a formação dos compostos. Para ele, átomos iguais tenderiam a se repelir, enquanto os que fossem diferentes

sofreriam atração entre si. Para a formação dos compostos, uma energia externa deveria ser fornecida a fim de romper a “nuvem calórica” existente ao redor de cada átomo.

Ainda buscando justificar a combinação entre os átomos, Dalton usou sua teoria para deduzir a **Lei das Múltiplas Proporções:** quando dois elementos A e B se combinam para formar mais de um composto, a massa de B que pode combinar com uma dada massa de A está na menor razão de número inteiros.

Isso significa que, de acordo com essa proposta, os átomos tendem a formar compostos binários na proporção 1:1. Uma das “falhas” na teoria de Dalton está justamente neste ponto. Se assim fosse, a molécula de água, por exemplo, deveria ser formada por apenas um átomo de hidrogênio e um átomo de oxigênio (HO), e não por dois átomos de hidrogênio e um de oxigênio (H2O) tal como a conhecemos hoje.

Outra restrição ao átomo de Dalton está na sua natureza elétrica. Para Dalton, o átomo, além de esférico e maciço (como uma “bola de bilhar”), era também neutro (Figura 1).v

Figura 1 - Ilustração do modelo atômico de Dalton.

Mais tarde, estudos no campo da Física, em especial com eletricidade, contestaram essas e outras limitações do modelo atômico elaborado por Dalton.

Figura 2 - John Dalton (1766-1844).

Modelo atômico de Thomson

Posteriormente ao modelo de Dalton, vários estudos mostraram que o átomo era constituído por partículas menores. As partículas **subatômicas** foram evidenciadas a partir de diversos experimentos que tinham como alvo principal estudar a eletricidade.

Um desses experimentos foi realizado por Henrich Geissler, vidreiro alemão, em 1857. Geissler criou um tubo (*tubo de Geissler*), que preencheu com gás (argônio, neônio ou ar), em pressão muito baixa. Em cada extremidade do tubo colocou eletrodos circulares. Quando aplicada uma carga elétrica de alta voltagem, dentro do tubo podia ser observada uma luz cuja cor dependia do gás utilizado.

Você certamente já se deparou com o resultado desse experimento ao observar os letreiros neon e lâmpadas fluorescentes.

Mais tarde, outro experimento semelhante ao de Geissler foi reproduzido pelo químico e físico William Crookes (1832-1919). Em seus experimentos, utilizou tubos de vidro providos de eletrodos nas extremidades (anodo e catodo). Quando os eletrodos eram ligados a uma fonte de alta tensão e pressão muito reduzida, observava-se uma luminescência esverdeada em uma das extremidades do tubo (na extremidade do eletrodo positiva – o anodo), denominada **raio catódico**.

Mesmo concluindo que a luminescência se tratava de um tipo de radiação que partia do eletrodo negativo (catodo) para o eletrodo positivo (anodo), Crookes não conseguiu caracterizar a natureza desse raio.

Em 1897, o cientista britânico J.J. Thomson realizou novos experimentos que o permitiram concluir que os raios catódicos eram propagados em linha reta. Isto porque, quando colocado um anteparo no interior do tubo, na trajetória da radiação, uma sombra com o formato desse anteparo é formada na extremidade do tubo.

? CURIOSIDADE

Assista a uma demonstração dos experimentos realizados por Thomson com os raios catódicos em: https://www.youtube.com/watch?v=_Pwrvn2ZI5U. Acesso em 26 de out. 2016.

Thomson também observou que, ao serem submetidos a campo elétrico externo alimentado por placas planas e paralelas, os raios se desviavam na direção da placa polarizada positivamente. Com isso, pôde-se verificar a natureza negativa dos **raios catódicos**. O que era ainda mais curioso: independentemente do gás

usado no experimento, o desvio dos raios em direção à placa externa carregada positiva acontecia sempre da mesma forma.

Pela primeira vez, a comunidade científica pôde idealizar a existência de partículas menores, que seriam parte da estrutura dos átomos. Segundo Thomson, os raios catódicos seriam formados por partículas pequeníssimas carregadas negativamente e que seriam comuns a todos os tipos de matéria.

Outro fenômeno importante foi observado quando os raios catódicos colidiam com uma ventoinha mecânica posicionada no interior do tubo que as fazia girar. Thomson então concluiu que os raios catódicos seriam cargas de eletricidade negativa sendo carregadas por partículas de matéria.

A questão que ainda continuava sem resposta era: o que são essas partículas? A partir de outros experimentos, Thomson conseguiu determinar a razão massa/carga (m/e) e a velocidade dessas partículas. Independentemente do tipo do gás com que o tubo era preenchido ou do material dos eletrodos, a m/e da partícula era sempre a mesma e era também menor do que a m/e do íon de hidrogênio. Isto significa que tais partículas deveriam ter massa menor e/ou carga maior que a do íon de hidrogênio.

Os resultados desses experimentos possibilitaram a Thomson elaborar um modelo que explicasse o comportamento dos raios catódicos e, consequentemente, criar um novo modelo atômico. Para Thomson:

- Sob intenso campo elétrico, as moléculas de gás se dividem em átomos primordiais, que ele chamou de **corpúsculos**;
- Os corpúsculos carregados negativamente, quando submetidos a campo elétrico intenso, deslocam-se do anodo para o catodo.

Mais tarde, os corpúsculos receberam o nome de **elétrons**.

? CURIOSIDADE

O nome **elétron** foi conferido por George Jonhstone Stoney (1826 – 1911), um cientista irlandês que concebeu os corpúsculos de Thomson como sendo átomos de eletricidade.

Reafirmando a descoberta de Thomson, Robert Millilkan (1868-1553) conseguiu medir a carga e a massa de um elétron com um experimento utilizando

uma gota de óleo em queda. Com esse experimento, foi possível quantizar a carga elétrica estabelecendo que nada pode ter carga menor que a de um átomo e que toda carga elétrica é um múltiplo da carga fundamental (Q= N.e, sendo Q= carga elétrica, N=número inteiro; e = carga do elétron).

? CURIOSIDADE

Assista ao famoso experimento da "gota de óleo" realizado por Millikan, que contribuiu para determinar a carga e a massa do elétron em: https://www.youtube.com/watch?v=xohI5URKRvA. Acesso em 26 de out. 2016.

O modelo atômico de Thomson foi o primeiro a ser proposto embasado em resultados experimentais. Em 1904, considerando a natureza neutra dos átomos, Thomson sugeriu que os átomos seriam bolhas esféricas formadas por grande quantidade de elétrons "mergulhados" e que circulavam em um fluido positivo.

Esse modelo sugere que o átomo poderia ser comparado a um "pudim de ameixas" (Figura 3). Quanto à estabilidade, o átomo obedeceria às leis da mecânica e eletromagnéticas, já bastante difundidas na época.

Figura 3 - Ilustração do átomo proposto por Thomson.

As fragilidades do modelo atômico de Thomson foram contestadas pouco tempo depois por Rutherford.

Modelo atômico de Rutherford

Assim como o modelo atômico de Thomson foi proposto baseado nos experimentos que buscavam estudar a eletricidade, o modelo de Rutherford foi influenciado pelas descobertas relacionadas à radioatividade.

A radioatividade foi descoberta no ano de 1896 por A. H. Becquerel (1852-1908) e é definida pela emissão de partículas e/ou radiação eletromagnética por certos tipos de matéria. Os materiais com essa propriedade são denominados **radioativos**.

Outros importantes cientistas dedicaram grande parte de suas vidas estudando a radioatividade, entre eles Pierre Curie (1859-1906), Marie Curie (1867-1934) e Rutherford.

O cientista neozelandês Ernest Rutherford (1871-1937) descobriu o núcleo do átomo e as partículas subatômicas que o compõem. Em 1908, Rutherford lecionava na Universidade de Manchester, quando solicitou aos alunos Johannes W. Geiger (1882-1945) e Ernest Marsden que realizassem um experimento que consistia em medir o espalhamento de partículas emitidas por radiação alfa quando bombardeadas contra uma fina folha de ouro.

? CURIOSIDADE

Assista à demonstração prática do experimento de Geiger e Marsden em: https://www.youtube.com/watch?v=2TmguQsnJf0. Acesso em 26 de out. 2016.

O resultado inesperado foi que, mesmo que grande parte das partículas tivesse atravessado a folha de ouro com desvio quase nulo (o que poderia ser previsto, considerando o modelo de Thomson), algumas partículas foram desviadas em vários ângulos. Isto aconteceu também quando o mesmo experimento era realizado com folhas de outros tipos de material (quanto mais pesado o material, maior a quantidade de partículas desviadas em grandes ângulos).

A partir desses resultados, Rutherford publicou, em 1911, um artigo no qual explicava sua proposta para um novo modelo atômico. Segundo ele, o átomo seria constituído por um núcleo positivo, bastante pequeno, onde se concentrava quase toda a massa do átomo. Os elétrons estariam localizados em uma grande nuvem que se movimentariam em órbita ao redor do núcleo.

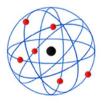



Figura 4 - Ilustração do átomo proposto por Rutherford.

Este modelo explica os resultados dos experimentos de Geiger-Marsden. As partículas alfa que atravessavam a nuvem de elétrons dos átomos sofriam poucos ou nenhum desvio. Já as que colidiam com o núcleo atômico eram ricocheteadas em diferentes ângulos.

Rutherford também pôde estimar o raio do núcleo atômico do ouro baseado em cálculos de espalhamentos que obedeciam aos princípios de interações coulombianas. Concluiu que o raio do núcleo atômico seria muito menor que o raio do átomo.

Em termos de dimensões, seria como se uma bola de tênis de mesa representasse o núcleo do átomo e fosse colocada no centro de um estádio de futebol, que seria o tamanho total do átomo.

O modelo de Rutherford divide a estrutura do átomo em duas regiões distintas: o núcleo e a nuvem de elétrons que o rodeia. Faltavam, ainda, algumas questões a ser respondidas:

- Quantos elétrons um átomo teria?
- Como seria constituído o núcleo?

Rutherford, juntamente com outros colaboradores, conseguiu, em 1919, pela primeira vez transformar um elemento em outro. Nesse experimento, o gás nitrogênio foi bombardeado com partículas alfa de alta energia. Com isso, alguns "**núcleos de hidrogênio**" foram detectados. Rutherford pôde concluir que esses núcleos só poderiam ser provenientes do núcleo do nitrogênio. O átomo de nitrogênio então foi transmutado em oxigênio, em um processo denominado reação nuclear.

Como o hidrogênio é o elemento de menor massa, os "núcleos de hidrogênio" foram caracterizados como unidades elementares do núcleo, comuns a todos os átomos, e que receberam o nome de **prótons**.

Apesar da descoberta do próton, a quantidade dessas partículas não justificava a massa total do núcleo. Além disso, seria impossível que partículas com cargas iguais ficassem confinadas em um espaço tão restrito como o do núcleo sem que houvesse repulsão.

Pensando nessas inconsistências, 13 anos após a descoberta do próton, Rutherford, após vários experimentos, descobriu uma radiação com carga nula e extremamente penetrante, composta por partículas neutras e com a mesma massa de um próton, o **nêutron**. A tabela 2 mostra os dados atuais das partículas subatômicas.

PARTÍCULA	MASSA (KG)	CARGA (C)	
Próton	1,672621636 x 10-27	1,602176487 x 10-19	NÚCLEO
Nêutron	1,672621636 x 10-27	0	
Elétron	9,10938215 x10-31	1,602176487 x 10-19	

Tabela 2 - Relação da massa e carga para partículas subatômicas.

A descoberta das partículas subatômicas, juntamente com a elaboração do modelo atômico de Rutherford, permitiu a classificação dos átomos através de dois números: **o número atômico (Z)** e o **número de massa (A)**.

O número atômico (Z) é o número de prótons em um átomo. É o valor referencial para a ordenação dos elementos na tabela periódica que define a identidade do átomo. Segundo a IUPAC, um elemento químico é uma entidade que representa um conjunto de átomos que possuem o mesmo número de prótons. Em um átomo neutro, ou seja, no estado fundamental, o número de elétrons é equivalente ao número de prótons existentes no núcleo. O número de massa (A) é o somatório das massas de todos os prótons e nêutrons presentes no núcleo de um átomo.

No caso de íons, deve-se representar a carga (q), pois são átomos em desequilíbrio elétrico, isto é, o número de elétrons não equivale ao número de prótons existentes no núcleo.

Para representar um átomo, utiliza-se a seguinte notação:

$$^{A}_{Z}X \quad \text{e} \quad ^{A}_{Z}X^{q}$$

Exemplos: $^{16}_{8}O$, $^{12}_{6}C$ e $^{23}_{11}Na^{+}$

Podemos determinar, a partir do número de massa e número atômico, a quantidade de cada partícula subatômica no átomo.

Exercício 1:

Quantos prótons, elétrons e nêutrons existem no elemento $^{107}_{47}Ag$?

Solução:

De acordo com a representação, o elemento Ag possui número atômico 47. Como o elemento está, segundo a representação, no estado fundamental (neutro), o número de prótons e elétrons é **47**. Sabendo que o número de massa é o

somatório do número de prótons e de nêutrons no núcleo do átomo, para determinar o número de nêutrons precisamos subtrair o valor do número de massa pelo número de prótons:

A= 107
n° de prótons = 47
n° nêutrons = 107 – 47 = 60

Vimos que os átomos de um mesmo elemento têm o mesmo número de prótons (mesmo número atômico). Porém, podem apresentar número de nêutrons diferente e, consequentemente, diferentes números de massa. Os átomos deste tipo são denominados isótopos. A tabela 3 apresenta alguns exemplos de isótopos.

ELEMENTO	SÍMBOLO	NÚMERO DE PRÓTONS	NÚMERO DE MASSA	ABUNDÂNCIA NA NATUREZA (%)
Hidrogênio	^{1}H	1	1	99,985
Deutério	^{2}H	1	2	0,015
Carbono-12	^{12}C	6	12	98,90
Carbono-13	^{13}C	6	13	1,10

Tabela 3 - Exemplos de isótopos de elementos.

O modelo atômico de Rutherford utilizou a teoria do eletromagnetismo, a mesma que o auxiliou a construí-lo. Segundo essa teoria, cargas em movimento emitem energia. Com o movimento do elétron ao redor do núcleo haveria perda de energia e, obedecendo à Física clássica, a energia mecânica diminuiria gradualmente, e sua trajetória corresponderia a um espiral até colidir com o núcleo. Se isto acontecesse, a matéria seria destruída quase que instantaneamente. Outro fator seria responsável pela estabilidade dos átomos.

Teoria atômica de Bohr

Devido a descobertas que sucederam o modelo atômico de Rutherford, os cientistas no início do século XX precisavam esclarecer alguns comportamentos

e propriedades que este modelo não era suficiente para explicar. Um exemplo foi a incapacidade da teoria clássica da radiação de explicar o efeito fotoelétrico e a periodicidade das propriedades dos elementos quando organizados na tabela periódica de Mendeleev.

Para que tais questionamentos fossem elucidados, um novo modelo atômico deveria ser formulado. A teoria que melhor satisfez as fragilidades do modelo de Rutherford foi elaborada por Niels Bohr e abriu as portas para um novo olhar quanto à estrutura do átomo: a natureza eletromagnética do átomo.

Teoria clássica da radiação

Até o início do século XX, a luz era definida como ondas eletromagnéticas (por exemplo: radiações ultravioleta e infravermelha; ondas de rádio) que se propagavam pelo espaço, deslocando-se por meio de ondas.

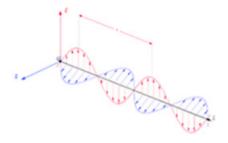



Figura 5 - Onda eletromagnética.

E o que seriam ondas? O movimento de uma onda mecânica se repete no tempo, ou seja, é periódico. Alguns elementos compõem as oscilações mecânicas. São eles:

- **Período (T)** - É o tempo que um corpo leva para fazer uma oscilação completa e é dado em unidade de tempo (em segundos - s);
- **Frequência (v)** - É o inverso de T, representando o número de oscilações completas que acontecem em um segundo e tem por unidade hertz (Hz);
- **Amplitude** - É o deslocamento máximo em relação ao eixo;
- **Comprimento de onda (λ)** - É a distância entre cristas sucessivas.

Na teoria clássica da radiação, a energia eletromagnética da luz dependia da amplitude, mas não da frequência nem do comprimento de onda. Apesar de fornecer a explicação de fenômenos ópticos, a teoria eletromagnética não era capaz de explicar a radiação com partida de corpos sólidos quentes. Diversos cientistas estudaram a natureza da radiação eletromagnética, a fim de entender se a luz é resultado da propagação de onda ou se é um feixe de partículas.

Linhas espectrais atômicas

A luz branca é a combinação de ondas com diversos comprimentos, no espectro visível. Quando o feixe dessa radiação atravessa uma fenda e em seguida um prisma, ao colidir com um anteparo, podemos observar um espectro contínuo de comprimentos de ondas (os comprimentos de ondas visíveis formam um espectro colorido semelhante ao arco-íris).

O gás hidrogênio, ao ser aquecido em altas temperaturas, ou quando é atravessado por eletricidade, emite luz. Se essa luz atravessa um prisma, observamos uma **linha espectral**, isto é, um conjunto de linhas diferentes em que cada uma é formada por ondas eletromagnéticas de um comprimento discreto.

Por muito tempo, diversos pesquisadores estudaram a linha espectral do hidrogênio e de outros elementos a fim de entender sua origem. Os trabalhos desenvolvidos por Bohr foram fundamentais para estabelecer a relação entre a linha espectral formada pelos elementos e a estrutura de seus átomos.

Niels H. D. Bohr (1885-1962) era um físico dinamarquês que trabalhou com Thomson e depois com Rutherford. Inicialmente, Bohr considerou o fenômeno da emissão de luz por gases quando estes são submetidos a altas temperaturas ou corrente elétrica. Concluiu que a radiação emitida é limitada a um comprimento de onda. Assim, verificou que, em um átomo, o elétron só pode ter certas quantidades específicas de energia, ou seja, **energia quantizada**.

Mas como seria possível relacionar as linhas espectrais com a energia quantizada emitida pelo átomo? E mais, qual seria a relação entre as linhas espectrais e a estrutura do átomo?

Para explicar a origem do espectro de linha, Bohr estabeleceu as seguintes conclusões:

- Um elétron em um átomo pode ter apenas um valor de energia;
- Em um átomo existe um conjunto de energias quantizadas (níveis ou camadas de energia) no qual os elétrons estão dispostos;

• Cada camada ou nível energético pode “abrigar” um número máximo de elétrons;

• Um átomo em estado fundamental tem todos os seus elétrons nos seus níveis mínimos de energia. Entretanto, quando absorvem energia externa (elétrica ou de uma chama), alguns elétrons ganham energia e migram para níveis de maior energia. Este estado é denominado estado excitado. Os elétrons excitados não permanecem nessas condições por muito tempo. Eles podem cair de níveis mais altos (E2) para níveis de menor energia (E1), liberando energia na forma de fótons de radiação eletromagnética. A energia do fóton liberado (Efóton) corresponde à diferença entre a energia do nível mais alto e a energia do nível mais baixo (E1 – E2). Assim:

$$\mathbf{E_{fóton} = (E_1 - E_2)} \qquad \textbf{[1.3]}$$

Como os níveis de energia no átomo são quantizados, a energia do fóton também é quantizada. Isto significa que, devido à relação entre a energia e o comprimento de onda de um fóton, vista anteriormente (equação 1.2), o comprimento de onda também será quantizado.

Em determinados estados excitados, podem ocorrer diversas transições de energia eletrônica de níveis mais energéticos para níveis menos energéticos. Cada uma dessas transições corresponde a uma linha individual no espectro do elemento.

A teoria de Bohr, quando aplicada ao átomo de hidrogênio, possibilitou prever o comprimento de onda que produziam as linhas no espectro do hidrogênio. Pôde também determinar a energia quantizada de cada nível do hidrogênio.

? CURIOSIDADE

A descoberta dos fótons

No início do século XX, dois físicos alemães, Max Planck e Albert Einstein, concluíram separadamente que todas as radiações eletromagnéticas se comportavam como se fossem compostas de minúsculos pacotes de energia chamados de fótons. Segundo a descoberta de Planck e Einstein, a energia de um fóton é dada pelo produto entre a constante de Planck ($h = 6{,}63 \times 10^{-34}$Js) e a frequência (v) da radiação:

$$E_{fóton} = h.v \qquad [1.1]$$

A energia do fóton também pode ser relacionada ao comprimento de onda e à velocidade da luz:

$$E_{fóton} = \frac{hc}{\lambda} \quad [1.2]$$

A partir dessa equação, vemos que um fóton de energia eletromagnética possui energia proporcionalmente inversa ao comprimento de onda.

Como base nesses experimentos, o modelo proposto por Bohr (Figura 7) comparava o átomo ao sistema solar, sendo o sol representado pelo núcleo e os planetas pelos elétrons, pois estariam se movimentando em órbitas ao redor do núcleo.

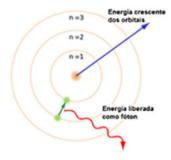



Figura 7 - Ilustração do modelo atômico de Bohr.

Cada órbita corresponderia a um nível energético quantizado. De acordo com Bohr, quanto maior fosse o raio da órbita (ou seja, quanto mais externo o nível), maior sua energia. Os níveis, ou órbitas, foram identificados por números (n= 1, 2, 3,...) ou por letras (K, L, M, N, O, P, Q).

NÍVEL (N)	CAMADA	NÚMERO MÁXIMO DE ELÉTRONS
1	K	2
2	L	8
3	M	18
4	N	32

NÍVEL (N)	CAMADA	NÚMERO MÁXIMO DE ELÉTRONS
5	O	32
6	P	18
7	Q	8

Tabela 4 - Relação de níveis e número máximo de elétrons.

Quanto à estabilidade dos elétrons, a teoria de Bohr propõe que, como a energia do elétron é quantizada, a emissão de energia contínua não é possível. Além disso, mostrou que existe uma energia mínima para um elétron que não é nula, que corresponderia à menor órbita permitida.

O modelo atômico de Bohr trouxe inúmeras contribuições para o entendimento da estrutura atômica. Entretanto, mediante as imperfeições que apresentava, como por exemplo, a incapacidade de explicar a regularidade da tabela periódica e os detalhes espectroscópicos de átomos com mais de um elétron, o modelo foi abandonado.

Modelo atômico moderno

A mecânica clássica, até as descobertas dos fenômenos quânticos, conseguiu explicar a relação entre várias forças no movimento da matéria. Entretanto, mostra-se falha em descrever o movimento de partículas com pequeníníssimas dimensões.

O Princípio da incerteza

Werner Heisenberg mostrou que existe uma limitação natural em se descrever o movimento de partículas muito pequenas. O princípio da incerteza de Heisenberg conclui que é impossível conhecer simultaneamente e com certeza a posição e a energia de uma partícula muito pequena, como no caso do elétron. Isto porque qualquer tentativa de determinar com exatidão qualquer uma das duas grandezas traria incerteza para a outra.

Para um elétron, podemos dizer que, independentemente da estrutura eletrônica que se imagine para um átomo, não é possível ter certeza da localização ou do movimento de seus elétrons.

De acordo com essa ideia, Max Born conclui que, se escolhermos estudar a energia de um elétron no átomo com pequena incerteza, precisamos aceitar a incerteza relacionada à grandeza que descreve sua posição no espaço ao redor do núcleo.

O modelo do átomo de Schrödinger

O modelo de hidrogênio de Schrödinger considera que o elétron no átomo deve ser descrito como uma onda e também como partícula, considerando a natureza dual onda/ partícula. As observações de Schröndiger originou equações matemáticas, as funções de onda (Ψ). Sobre estas, devemos destacar:

- O comportamento do átomo é mais bem descrito como onda estacionária. Isto significa que apenas determinadas funções de onda são permitidas;
- Cada valor permitido de energia para um elétron se relaciona com uma função de onda;
- A função de onda elevada ao quadrado (Ψ^2) está associada à probabilidade de se encontrar um elétron dentro de determinada região no espaço;
- A região no espaço onde há maior probabilidade de se encontrar um elétron é definida como **orbital**;
- A equação de Schröndinger para um elétron que descreve os orbitais é caracterizada pelos valores de três números inteiros. Esses números são chamados de número **quântico principal** (n), número quântico secundário (l) e número quântico magnético (m).

Números quânticos

Os números quânticos são três números inteiros que exercem um papel importante para determinar os estados energéticos e os níveis em que o elétron se encontra na estrutura de um átomo. Em outras palavras, são o "endereço" do elétron e indicam sua energia relativa e posição estimada.

A seguir, conheceremos os números quânticos e seus significados.

Número quântico principal (n)

É fator primário na definição da energia do orbital em sistemas monoeletrônicos e é o determinante principal da energia em sistemas multieletrônicos. Pode ser qualquer número inteiro positivo a partir de 1. Para o hidrogênio, por exemplo, a energia é dada apenas em função de ***n***.

O número quântico principal determina o tamanho do orbital, ou seja, quanto maior o valor de ***n***, maior a distância média entre o elétron e o núcleo. No átomo, cada elétron possui ***n*** determinado. Em átomos com mais de um elétron, aqueles que possuem o mesmo valor de ***n*** ocupam o mesmo nível energético ou camada energética.

Número quântico secundário ou azimutal (l)

Em um determinado nível, os elétrons podem estar agrupados em **subcamadas** ou **subníveis**. Cada subnível tem um formato diferente e a ele é atribuído um número quântico l específico. Esse número determina a forma de um orbital e, até certo ponto, sua energia.

O número quântico l pode variar de 0 até ***n***-1. Desta forma, o valor de n limita o número de subcamadas, não podendo l ser maior que n. Por exemplo: quando ***n***=1, l=0, ou seja, apenas um subnível é possível. Entretanto, se ***n***=2, a camada possuirá dois subníveis, pois l poderá ser 0 ou 1.

Os subníveis e valores de l podem também ser representados por símbolos, conforme mostra a tabela a seguir:

VALORES DE L	SÍMBOLOS DA SUBCAMADA CORRESPONDENTE
0	s
1	p
2	d
3	f

Tabela 5 - Relação entre valores de l e os símbolos do subnível.

Assim, o subnível com número quântico $\boldsymbol{l}$ = 2 pode ser também chamado de subnível d, e o orbital presente nesse subnível é denominado orbital d.

O formato dos orbitais diferencia-se de subnível para subnível. O aspecto do orbital indica a região onde há maior probabilidade de o elétron ser encontrado. Quanto maior o número quântico azimutal, maior é a complexidade dos orbitais.

? CURIOSIDADE

Veja a configuração 3D dos orbitais atômicos dos subníveis s, p, d e f em:
http://www.quimica3d.com/animations/18.php. Acesso em 26 de out. 2016.
http://www.quimica3d.com/animations/19.php. Acesso em 26 de out. 2016.

Número quântico magnético (m_l)

O número quântico magnético (**m_l**) é associado à forma como os orbitais se orientam no espaço dentro de um subnível. Todos os orbitais de um subnível apresentam a mesma energia, porém posição espacial distinta.

Os valores de **m_l** podem variar entre $+\boldsymbol{l}$ e $-\boldsymbol{l}$, tendo como valor central o 0. A quantidade de valores para ml determina o número de orbitais que o subnível possui. Na tabela 6 estão os valores possíveis para **m_l** em cada subnível e o número de orbitais.

VALORES DE L	NÚMEROS QUÂNTICOS MAGNÉTICOS POSSÍVEIS	NÚMERO DE ORBITAIS
0	0	1
1	-1, 0, +1	3
2	-2, -1, 0, +1, +2	5
3	-3, -2, -1, 0, 1, +2, +3	7

Tabela 5 - Relação entre valores de ml e os números de orbitais.

Os números quânticos são fundamentais para a previsão do local onde o elétron se encontra no átomo. Como vimos, o número quântico principal $\boldsymbol{n}$ indica o nível energético em que o elétron se encontra. Internamente à camada, o número quântico azimutal $\boldsymbol{l}$ refere-se à qual a subcamada pertence e, nesta subcamada, o

número quântico magnético m_l indica a orientação espacial do orbital onde está localizado. Cada elétron pertencente a um átomo possui uma combinação única de números quânticos que determinam sua localização nesse átomo.

Nos átomos, os elétrons são distribuídos nos orbitais dos subníveis. Dependendo do valor de n, uma camada pode ter mais que um subnível.

Os subníveis são representados simbolicamente pelo número quântico principal e, em seguida, pelo símbolo do subnível correspondente. Por exemplo: para n=1, só existe um subnível possível, logo é representado pelo símbolo **1s**.

Esta tabela traz de forma resumida algumas informações que apresentam de maneira objetiva a interação entre os três números quânticos estudados:

NÚMERO QUÂNTICO PRINCIPAL (N)	NÚMERO QUÂNTICO AZIMUTAL	NÚMERO QUÂNTICO MAGNÉTICO (M_L)	NÚMERO DE ORBITAIS NAS SUBCAMADAS
1	0	0	Um orbital 1s
2	0 1	0 -1, 0, +1	Um orbital 2s Três orbitais 2p
3	0 1 2	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2	Um orbital 3s Três orbitais 3p Cinco orbitais 3d
4	0 1 2 3	0 -1, 0, +1 -2, -1, 0, +1, +2 -3,-2, -1, 0, +1, +2, +3	Um orbital 4s Três orbitais 4p Cinco orbitais 4d Sete orbitais 4f

Tabela 7 - Relação e interação entre os números quânticos.

ATIVIDADE

1. Teoria atômica é a teoria científica que defende a matéria como sendo constituída por unidades fundamentais, os átomos. Durante os anos, o modelo que representa o átomo tornou-se mais complexo e detalhado à medida que novas descobertas surgiam, principalmente

no campo da Física e da Química. Aponte as principais diferenças entre os modelos atômicos de Dalton, Thomson, Rutherford, Bohr e o modelo quântico moderno.

2. Isótopos são átomos de um elemento químico que possui as mesmas quantidades de prótons e diferenciam-se pelo número de massa. Observe os isótopos do carbono e indique, para cada um, o número de prótons, elétrons e nêutrons.

$^{12}_{6}C$ $^{13}_{6}C$ $^{14}_{6}C$

REFLEXÃO

O homem sempre buscou investigar a origem e a composição do mundo. Diversos vieses buscaram entender a matéria, inclusive as ideias religiosas, filosóficas e as evidências da ciência.

Vimos como importantes nomes da ciência influenciaram, em suas épocas e mesmo com suas limitações, a construção dos conceitos sobre a matéria como a conhecemos hoje. Isto porque a limitação ou "falha" em um modelo foi objeto de estudo para que um novo modelo, mais complexo e detalhado, surgisse.

De modelo em modelo, o desenho da matéria mais aceito hoje em dia é justificado por leis da Física Quântica. Observando fenômenos microscópicos, a Química em nível macroscópio pode ser compreendida.

Como ciência em constante transformação, a Química ainda tem muitos fenômenos que carecem de explicações. Esta é a missão dos cientistas da atualidade e das gerações futuras. Afinal, a busca pelo conhecimento é intrigante, estimulante e sem limites.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ATKINS, P.W; JONES, L. **Princípios de Química:** questionando a vida e o meio ambiente. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

BRADY J. E.; HUMISTON, G.E. **Química Geral.** 2. ed. Vol. 1. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1986.

BROWN, T L.; H. E.; BURSTEN, B. E; BURDGE, J. R. **Química, a ciência central,** 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

FILGUEIRAS, C.A; Duzentos anos da teoria atômica de Dalton. **Química Nova na Escola**, nº 20, 2004.

KOTZ, J. C, TREICHEL, P.M.; WEAVER, G.C. **Química e Reações Químicas.** 6. ed. Vol. 1. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

PINHEIRO, L.A.; COSTA, S. S. C.; MOREIRA, M. A. Do átomo grego ao Modelo Padrão: os indivisíveis de hoje. **Texto de apoio ao professor de Física,** vol.22, nº 6, 2011.

REZENDE, JM. **À sombra do plátano:** crônicas de história da medicina. São Paulo: Editora Unifesp, 2009. Disponível em: http://static.scielo.org/scielobooks/8kf92/pdf/rezende-9788561673635.pdf. Acesso em 26 de out. 2016.

4

Estrutura eletrônica, tabela periódica e periodicidade

Estrutura eletrônica, tabela periódica e periodicidade

Introdução

No capítulo anterior, vimos como os modelos para representar a estrutura do átomo, a unidade fundamental da matéria, evoluiu ao longo dos anos. O modelo quântico primeiramente foi estudado para um átomo de apenas 1 próton e 1 elétron. Obviamente o modelo mais adequado é aquele que atende a descrição de todos os elementos.

Neste capítulo, abordaremos o modelo moderno, englobando a estrutura eletrônica dos átomos e como esse arranjo influencia nas propriedades físicas e químicas dos elementos e, consequentemente, dos compostos que formam. Além disso, veremos como os elementos são organizados a partir dessas propriedades.

OBJETIVOS

- Relacionar os conceitos referentes ao spin eletrônico e ao princípio de exclusão de Pauli;
- Reconhecer a distribuição dos elétrons nas subcamadas atômicas, de acordo com a energia;
- Estabelecer a configuração eletrônica dos átomos e íons;
- Identificar as propriedades atômicas, tendências periódicas e propriedades químicas.

O spin eletrônico (m_s)

No século XX, experimentos demonstraram que o elétron realiza um movimento rotacional no próprio eixo, semelhante ao movimento da Terra. Este comportamento confere ao elétron uma propriedade que é explicada a partir dos princípios do **magnetismo**.

CURIOSIDADE

Radicais Livres em Sistemas Biológicos e Aplicação da Técnica de EPR

A evolução dos estudos sobre o papel de radicais livres em sistemas biológicos foi lenta e marcada por controvérsias. Por muito tempo, permaneceu predominante a ideia de que radicais

livres seriam apenas deletérios aos organismos vivos e associados a processos degenerativos como envelhecimento, câncer e inflamação. Atualmente, sabemos que radicais livres também exercem importantes papéis fisiológicos, participando da homeostase (equilíbrio) dos sistemas biológicos. Os radicais livres, por serem espécies (moléculas, íons) que possuem elétrons desemparelhados, podem ser detectados pela técnica de ressonância paramagnética eletrônica (EPR). Utilizando a técnica de EPR, detectamos e caracterizamos radicais livres e complexos paramagnéticos como ânion radical carbonato, complexos do radical óxido nítrico com biomoléculas, radical cisteinila e radical glutationila em sistemas biológicos como plasma, eritrócitos, tecido inflamatório, bile e outros tecidos de humanos e de animais. A utilização da técnica de EPR, para detecção e caracterização de radicais livres em sistemas biológicos, tem sido importante na investigação do papel fisiológico dessas espécies.

Fonte: http://sistemas.rei.unicamp.br/ggbs/conpuesp/posteres/2011930112116.pdf. Acesso em 27 de out. 2016.

O sentido em que o elétron gira (horário ou anti-horário) é representado pelo quarto número quântico: o número magnético de spin eletrônico **(m_s)**. Juntamente com os números quânticos ***n***, ***l***, ***ml***, o número magnético de spin eletrônico completa a descrição de um elétron na estrutura do átomo.

Paramagnetismo e o desemparelhamento de elétrons

De modo geral, as substâncias são fracamente repelidas por ímã. Isto refere-se a um comportamento **diamagnético**, ou seja, são substâncias diamagnéticas. Quando as substâncias são atraídas por ímã, são denominadas **paramagnéticas** (ex.: metais). O paramagnetismo da maioria das substâncias só pode ser observado quando são submetidas a forte campo eletromagnético. Como exemplo, o oxigênio sofre atração por um ímã forte, ficando aderido a seus polos.

A origem do paramagnetismo das substâncias está no movimento rotacional em torno do eixo que os elétrons fazem, ou seja, no spin dos elétrons. Quando um átomo contendo apenas um elétron **desemparelhado** é submetido a um campo magnético, somente duas orientações são observadas: alinhado ou contrário ao campo magnético.

Cada spin eletrônico é quantizado e a eles são atribuídos valores de números quânticos magnéticos de spin $m_s = +1/2$ ou $m_s = -1/2$.

Em um orbital, o elétron pode assumir qualquer um dos valores de número magnético de spin. Experimentalmente, o hidrogênio (que tem apenas um elétron

em cada átomo) apresenta comportamento paramagnético. Já o hélio, com dois elétrons na estrutura atômica, tem comportamento diamagnético.

A diferença de comportamento entre essas duas substâncias pode ser justificada pela presença de elétrons com spins opostos, no mesmo orbital, que o hélio apresenta. Neste caso os elétrons estão emparelhados. Isto significa que os campos magnéticos gerados pelos elétrons são anulados mutuamente, uma vez que "giram" em direções opostas.

Quando apenas um elétron ocupa determinado orbital, é definido como elétron desemparelhado, o que confere ao átomo característica paramagnética, como é o caso do hidrogênio.

Em outras palavras, podemos dizer que as substâncias paramagnéticas apresentam em sua estrutura elétrons **desemparelhados**, enquanto aquelas em que os elétrons se encontram dispostos em pares (**emparelhados**) nos orbitais são diamagnéticas.

? CURIOSIDADE

O fenômeno do magnetismo é realmente fascinante. Leia mais sobre como o magnetismo foi descoberto e seus princípios físicos em: http://www.cbpf.br/~labmag/miguel.pdf. Acesso em 27 de out. 2016.

Princípio de exclusão de Pauli e a distribuição eletrônica

O físico Wolfgang Pauli nasceu em 1900, na Áustria. Aos 25 anos, divulgou o que conhecemos como Princípio de Exclusão de Pauli.

Segundo Pauli, dois elétrons não podem ter conjuntos idênticos de números quânticos (n, l, m_l, m_s). Sendo assim, um mesmo orbital atômico não pode abrigar mais de dois elétrons. Isto significa que, ainda que dois elétrons tenham mesmos números n, l, m_l, os valores de m_s serão diferentes.

Por exemplo: o elemento hélio tem apenas dois elétrons, que apresentam números iguais de n, l, m_l,(n=1; l=0; m_l=0); porém esses elétrons apresentam sentido de rotação diferente, que é representado por diferentes valores de m_s (+1/2 ou -1/2).

Em um orbital, o sentido de rotação do elétron é especificado e representado por uma seta direcionada para cima (↑) ou para baixo (↓). Por conveniência, relacionaremos o símbolo ↑ com o elétron que apresenta o valor de m_s = +1/2 e ↓para aquele com valor de m_s = -1/2.

Ilustrativamente, vamos representar o orbital como uma caixa **(diagrama de orbitais em caixas)**, sabendo, entretanto, que os orbitais são ondas de elétrons. Tomando por exemplo o átomo de hidrogênio, que tem apenas um elétron e um orbital em sua estrutura (1s), o único conjunto de números quânticos possíveis é: $n=1$, $l=0$, $m_l=0$ e $m_s = +1/2$. O elétron do hidrogênio no orbital é representado como:

↑

1s

$n=0$; $l=0$; $m_l=0$; $m_s=+1/2$

Um átomo que possui dois elétrons, o gás hélio, também possui apenas um orbital 1s. Ambos os elétrons ocuparam o mesmo orbital, porém, segundo o princípio de exclusão de Pauli, eles devem apresentar rotação em sentidos opostos, ou seja, números quânticos de spin (ms) diferentes.

↑↓

1s

$n=0$; $l=0$; $m_l=0$; $m_s=+1/2$

$n=0$; $l=0$; $m_l=0$; $m_s=-1/2$

Percebemos que cada elétron do átomo de hélio possui um conjunto de número quântico próprio que se diferencia apenas pelo número m_s. Os três primeiros números são idênticos pois descrevem o orbital.

Como vimos, um orbital pode comportar, no máximo, dois elétrons. Assim, podemos prever a capacidade máxima de elétrons encontrados nas subcamadas (ou subníveis) e camadas. A Tabela 1 apresenta o número máximo de elétrons nos subníveis e níveis.

NÍVEL (N)	SUBNÍVEIS	ORBITAIS DISPONÍVEIS (2L+1)	NÚMEROS MÁXIMO DE ELÉTRONS EM SUBNÍVEIS	NÚMERO MÁXIMO DE ELÉTRONS NAS CAMADAS
1	s	1	2	2
2	s p	1 3	2 6	8

NÍVEL (N)	SUBNÍVEIS	ORBITAIS DISPONÍVEIS (2L+1)	NÚMEROS MÁXIMO DE ELÉTRONS EM SUBNÍVEIS	NÚMERO MÁXIMO DE ELÉTRONS NAS CAMADAS
3	s p d	1 3 5	2 6 10	18
4	s p d f	1 3 5 7	2 6 10 14	32
5	s p d f	1 3 5 7	2 6 10 14	32
6	s p d	1 3 5	2 6 10	18
7	s p	1 3	2 6	8

Tabela 1 - Relação da capacidade máxima de acomodação dos elétrons por níveis e subníveis.

Até o momento, estudamos apenas átomos com poucos elétrons. A distribuição dos elétrons em átomos com muitos elétrons deve seguir o "princípio da construção", também chamado de princípio de **Aufbau**. Por este princípio, os elétrons são distribuídos a partir dos subníveis de menor energia para os de maior energia, de tal maneira que a energia do átomo seja a menor possível.

Apesar de os estudos de Bohr com o elétron único do hidrogênio indicarem que a energia do átomo dependeria apenas do valor de *n*, segundo o modelo quântico átomos com vários elétrons dependem dos valores de ***n*** e ***l***. A Figura 1 ilustra a ordem de energias dos subníveis, determinadas experimentalmente.

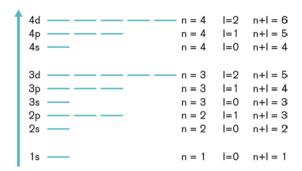



Figura 1 - Ordem de energias dos subníveis determinadas experimentalmente.

A acomodação dos elétrons de um átomo deve respeitar a ordem crescente de energia das subcamadas. Essa ordem leva em consideração o somatório entre o valor de ***n*** e o valor de ***l*** (***n*+l**). Se dois subníveis têm o mesmo valor de ***n*+l**, os elétrons são alocados no subnível de menor ***n***. Em um mesmo nível, os elétrons são distribuídos, primeiramente, no subnível de energia mais baixa.

Na figura 1, observamos que a energia do subnível 4s (***n*+l=4**) é menor que a energia do subnível 3d (***n*+l=4**). Logo, os elétrons de um átomo devem preencher o subnível 4s antes do subnível 3d.

A ordem de preenchimento é ilustrada pelo Diagrama de Linus Pauling (Figura 2). Começamos no subnível de menor energia (1s) e seguimos as setas, conforme o aumento do valor de ***n*+l**:

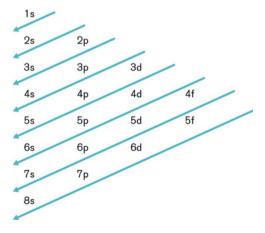



Figura 2 - Diagrama de Linus Pauling.

A distribuição eletrônica é também denominada **configuração eletrônica**. No estado fundamental, a configuração eletrônica indica a localização dos elétrons no átomo. É importante compreendermos a maneira como essa organização acontece, uma vez que a configuração eletrônica está relacionada a diversos fatos químicos, inclusive a disposição dos elementos químicos na tabela periódica.

A representação da configuração eletrônica pode se dar por meio do diagrama de orbital em caixa, que já vimos neste capítulo, ou por meio da notação espectroscópica (ou notação **spdf**).

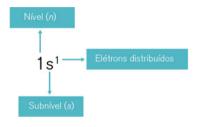



Figura 3 - Notação espectroscópica spdf.

EXEMPLO

a) Li (Z=3)

Notação espectroscópica: $1s^2\ 2s^1$

Diagrama em caixas:

b) Be (Z=4)

Notação espectroscópica: $1s^2\ 2s^2$

Diagrama em caixas:

c) B (Z=5)

Notação espectroscópica: $1s^2\ 2s^2\ 2p^1$

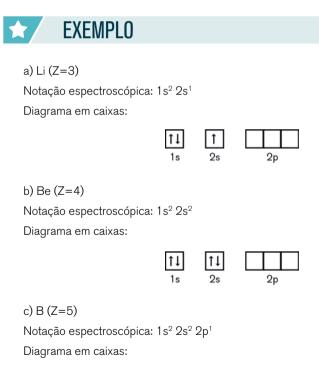
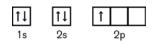
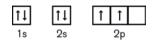



Diagrama em caixas:

d) C (Z=6)

Notação espectroscópica: $1s^2$ $2s^2$ $2p^2$

Diagrama em caixas:

Observe que na distribuição os elétrons do carbono (Z=6) alocados no subnível ***2p*** não ocupam o mesmo orbital. Se cada orbital pode comportar até dois, por que esses elétrons ocupam orbitais diferentes?

Este fato foi evidenciado pelo físico alemão Friedich H. Hund (1896-1997), em 1927, quando publicou o trabalho que resumiu dados experimentais de que os elétrons, no mesmo subnível, tendem a permanecer desemparelhados (em orbitais distintos), com spins direcionados no mesmo sentido. Os elétrons em orbitais distintos apresentam menor repulsão intereletrônica, o que lhes confere um estado energético mais favorável.

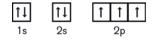
Denominada **regra de Hund**, esse princípio norteia a distribuição de elétrons nos diagramas de orbitais juntamente com o princípio de exclusão de Pauli.

Para representar a distribuição dos elétrons de um elemento, os orbitais devem ser preenchidos elétron a elétron. Quando o subnível apresentar mais de um orbital disponível, alocam-se os elétrons com spins paralelos nos orbitais até que cada um deles esteja preenchido com um elétron. A partir daí, outros elétrons podem ser colocados nos orbitais, com spins contrários, até que todos os elétrons do átomo estejam arranjados ou que o subnível esteja completamente preenchido.

Observe a aplicação desses conceitos na distribuição eletrônica dos elementos a seguir:

N (Z=7)

Notação espectroscópica: $1s^2$ $2s^2$ $2p^3$

Diagrama em caixas:

O (Z=8)

Notação espectroscópica: $1s^2\ 2s^2\ 2p^4$

Diagrama em caixas:

Cl (Z=9)

Notação espectroscópica: $1s^2\ 2s^2\ 2p^5$

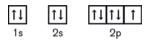
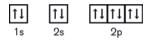



Diagrama em caixas:

Ne (Z=10)

Notação espectroscópica: $1s^2\ 2s^2\ 2p^5$

Diagrama em caixas:

COMENTÁRIO

As configurações eletrônicas são geralmente representadas condensando a **notação do gás nobre** com a **notação spdf**. Por exemplo: a distribuição que precede o elétron abrigado no subnível 3s do elemento sódio (Na, Z=11) é idêntica à configuração eletrônica do neônio, e por isso podemos substituí-la pelo símbolo do elemento entre colchetes:

Na (Z=11)

Notação espectroscópica: $1s^2\ 2s^2\ 2p^5\ 3s^1$ ou [Ne] $3s^1$

Configuração eletrônica e a tabela periódica

Antes mesmo dos conhecimentos sobre o comportamento quântico da matéria, os químicos já entendiam diversas propriedades químicas e físicas de alguns elementos, estabelecendo semelhanças entre alguns átomos de elementos distintos.

Basicamente essas comparações entre os elementos se referiam aos estudos das massas atômicas. Uma vez que métodos bastante precisos dessa grandeza já

estavam disponíveis, relacionar a massa com as propriedades dos elementos e organizá-los a partir dessa correlação parecia aos cientistas uma lógica bastante razoável durante o século XIX.

Atualmente, sabemos que a massa atômica não é exatamente a propriedade fundamental do átomo, pois seu valor pode variar para um mesmo elemento. Lembre-se que os isótopos são átomos do mesmo elemento com massas diferentes devido ao número de nêutrons distintos.

Veja alguns modelos propostos para a organização dos elementos químicos:

1817	Johann Döbereiner	Criou as tríades de Döbereiner, nas quais separou grupos de três elementos com propriedades semelhantes, por ordem crescente de massa atômica
1862	Alexandre de Chancourtois	Criou o caracol de Chancourtois, no qual dispôs os elementos em ordem crescente de massa atômica, em linha helicoidal, que recobria uma superfície cilíndrica. Os pontos correspondentes sobre as voltas diferiam da hélice em 16 unidades.
1864	John Newlands	Estabeleceu a Lei das Oitavas. Organizou os elementos em um quadro com sete colunas por ordem crescente de massa atômica, no qual todos os elementos apresentavam características semelhantes às do oitavo elemento.

Apesar de apresentarem alguma lógica, nenhum desses modelos foi capaz de agrupar de maneira organizada e satisfatória os elementos químicos de acordo com suas propriedades similares.

A organização mais representativa e que originou a tabela periódica atual foi elaborada por Dmitri Mendeleev. O físico e químico russo estabeleceu um padrão que permitiu organizar todas as informações acerca dos elementos em que a base seria a repetição regular e periódica das propriedades.

A tabela periódica de Mendeleev sofreu diversas alterações até chegar à estrutura padrão que é reconhecida hoje. As últimas alterações foram estabelecidas pela IUPAC (*International Union of Pure and Applied Chemistry*) recentemente, quando foram inseridos quatro novos elementos, de números atômicos 113, 115, 117 e 118.

? CURIOSIDADE

Leia sobre os mais novos elementos químicos conhecidos em: http://iupac.org/cms/wp-content/uploads/2016/01/IUPAC-Press-Release_30Dec2015.pdf. Acesso em 27 de out. 2016.

Na tabela periódica atual, os elementos são arranjados em ordem crescente de número atômico e organizados da seguinte forma:

- Os elementos estão dispostos em colunas verticais designadas como grupos ou famílias, de acordo com suas propriedades físicas e químicas similares. Cada grupo é caracterizado por um número (de 0 a 8 em algarismos arábicos), seguido das letras A ou B. Esse modelo é convencionalmente usado nos Estados Unidos e Europa (na convenção europeia, o último grupo é definido pelo algarismo 0, enquanto na americana recebe o nome de grupo 8A). Os elementos que constituem os grupos terminados pela letra A são designados como principais ou representativos, e aqueles compõem os grupos terminados pela letra B são os denominados elementos de transição. Os grupos também podem ser numerados de 1 a 18 em algarismos árabes, segundo recomendação da IUPAC. Esta será a denominação adotada neste livro.
- Para os elementos representativos, o número do grupo indica quantos elétrons o átomo possuirá na última camada. Por exemplo: os elementos do grupo 1 (ou 1A) apresentam 1 elétron na última camada, enquanto os elementos do grupo 13 (ou 3A) possuem 3 elétrons;
- As linhas horizontais da tabela recebem o nome de períodos. Os períodos são numerados de cima para baixo. Cada período representa o número de níveis ou camadas que o elemento tem. Por exemplo: o primeiro período apresenta apenas dois elementos — o hidrogênio (H) e o hélio (He), que possuem apenas um nível.

Outras divisões a partir das características dos elementos podem ser identificadas na tabela periódica. Nelas, os elementos podem ser classificados como: metais, metaloides e não metais.

De forma geral, os elementos assumem características menos metálicas da esquerda para a direita em um mesmo período.

Algumas propriedades físicas e químicas dos metais são facilmente identificadas no nosso cotidiano. Geralmente são sólidos (exceto o mercúrio), conduzem eletricidade e são dúcteis (capazes de ser transformados em fios), maleáveis (podem ser transformados em lâminas finas) e apresentam brilho. Podem ainda formar ligas com outros metais.

Os elementos considerados não metálicos têm uma grande variedade de características. Podem ser encontrados na natureza, em temperatura ambiente, no estado sólido (carbono, enxofre, iodo e fósforo), líquido (bromo) ou gasoso (nitrogênio, oxigênio, flúor e cloro). A principal característica que difere os não metais dos metais é que, à exceção do carbono na forma de grafite, os não metais não conduzem eletricidade.

Alguns elementos intermediários entre os metais e os não metais possuem caraterísticas que dificultam sua classificação. Eles são classificados como metaloides ou semimetais. Na comunidade científica, existe ainda muita divergência sobre como ou quais elementos devem ser inseridos nesta classificação. Um critério bem aceito é o de que metaloides apresentam, concomitantemente, características de metais e não metais. Assim, incluímos nessa categoria os seguintes elementos: boro (B), silício (Si), germânio (Ge), arsênio (As), antimônio (Sb) e telúrio (Te).

Group→ ↓Period	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
	1 H																	2 He
	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
	55 Cs	56 Ba	* 71 Lu	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
	87 Fr	88 Ra	† 103 Lr	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Uut	114 Fl	115 Uup	116 Lv	117 Uus	118 Uuo
			* 57 La	58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb		
			† 89 Ac	90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No		

Figura 1 - Tabela periódica dos elementos químicos.

A tabela periódica pode também ser dividida em blocos, de acordo com a configuração eletrônica dos elementos. Os grupos 1 e 2 são chamados também de metais alcalinos e alcalinos terrosos, respectivamente; são compostos cujo subnível

mais energético é do tipo ***s***. Do grupo 3 ao 12, as distribuições eletrônicas dos elementos terminam em subníveis do tipo ***d***. Já os elementos dos grupos 13,14, 15, 16, 17 e 18 apresentam subníveis do tipo ***p*** como sendo os mais energéticos.

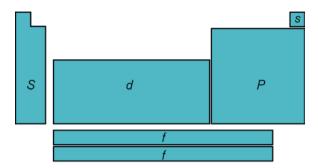



Figura 2 - Divisão da tabela periódica por blocos, segundo a distribuição dos elétrons nos subníveis de maior energia.

Propriedades periódicas dos elementos

A compreensão da configuração eletrônica dos elementos auxiliou os cientistas a perceber que a semelhança nas propriedades dos elementos está relacionada ao arranjo dos elétrons na última camada (ou camada de valência). Algumas destas propriedades mudam de forma, como pode ser previsto ao longo de um grupo ou período. Esta previsão nos permite entender as propriedades químicas dos elementos e dos compostos que formam.

Raio ou tamanho atômico

Já vimos que os elétrons traçam trajetórias ao redor do núcleo de um átomo que correspondem a determinadas funções de ondas. Sendo assim, podemos presumir que o contorno de um átomo não é definido. Como seria possível, então, determinar o tamanho de um átomo?

Existem diversas maneiras de se resolver esta questão. A mais simples delas é considerar como tamanho do átomo a distância entre átomos em uma amostra do elemento. Podemos pensar, a princípio, em uma molécula diatômica como o oxigênio (O2) e considerar que o tamanho do átomo de oxigênio corresponde à distância entre os dois núcleos. Esta distância pode ser medida experimentalmente.

A distância entre os núcleos desses átomos é de 112 pm. Ou seja, o raio atômico equivale a 66 pm.

No caso dos metais, a distância pode ser prevista pela medida da distância entre os átomos em um cristal do metal.

A variação do raio atômico ao longo da tabela periódica pode ser estabelecida a partir da medida do tamanho atômico de grande parte dos elementos. Podemos constatar, então, que **os raios atômicos aumentam de cima para baixo, em um mesmo grupo, e diminuem ao longo de um período**.

A justificativa deste comportamento revela dois efeitos importantes:

(a) O tamanho do átomo depende dos elétrons mais externos. Em um mesmo grupo, os elétrons mais externos são arranjados em orbitais com números quânticos principais maiores à medida que se aumenta o número atômico;

(b) Em um mesmo período, o número quântico principal dos elétrons mais externos é o mesmo para todos os elementos. Entretanto, ao longo do período, os números atômicos aumentam. Isto significa que o número de prótons no núcleo aumenta, assim como o número de elétrons. O aumento da carga positiva no núcleo faz aumentar a atração entre ele e os elétrons da camada mais externa e, como consequência, observa-se a retração do raio atômico.

Essas relações se aplicam bem aos elementos principais; entretanto não são exatamente reproduzidos nos metais de transição.

Percorrendo da esquerda para a direita em um mesmo período, os raios atômicos dos primeiros elementos seguem a tendência vista para os elementos principais: diminuem.

Nos elementos mais centrais da série, há pouca variação dos raios atômicos. Isto porque a atração entre o núcleo e os elétrons da camada de valência é de certa forma anulada pela repulsão entre os elétrons que ocupam os orbitais **d** do subnível mais energético e que estão em uma camada mais interna.

Os últimos elementos do bloco dos metais de transição do mesmo período aumentam de tamanho, pois o subnível **d** é preenchido e a repulsão entre seus elétrons faz que o raio aumente.

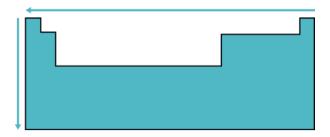



Figura 3 - Tendência dos raios atômicos.

Energia de ionização

Definimos como energia de ionização (EI) a energia necessária para retirar um elétron de um átomo no estado gasoso, formando um íon carregado positivamente (cátion).

$$X_{(g)} + \textit{ENERGIA} \rightarrow X^{+}_{(g)} + e^{-}$$

Um elétron na camada de valência pode ser "arrancado" de um átomo se for fornecida energia suficiente para superar a energia da atração entre ele e a carga nuclear. Quando os átomos possuem mais de um elétron, apresentam uma sequência crescente de EI.

EXEMPLO

Primeira energia de ionização do magnésio: IE1 = 738 kJ/mol

$$Mg_{(g)} \rightarrow Mg^{+}_{(g)} + e^{-}$$

Distribuição eletrônica

Mg (Z= 12)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^2$

Mg+ (Z= 12)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$

Segunda energia de ionização do magnésio: IE2 = 1451 kJ/mol

$$Mg^{+}_{(g)} \rightarrow Mg^{+2}_{(g)} + e^{-}$$

Distribuição eletrônica

Mg+ (Z= 12)

$1s^2\ 2s^2\ 2p^6\ 3s^1$

Mg^{+2} (Z= 12)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^0$

Terceira energia de ionização do magnésio: IE3 = 7733 kJ/mol

$Mg^{+2}_{(g)} \rightarrow Mg^{+3}_{(g)} + e^-$

Distribuição eletrônica

Mg^{+2} (Z= 12)

$1s^2 2s^2 2p^6 3s^0$

Mg+3 (Z= 12)

$1s^2 2s^2 2p^5$

Veja que, após a retirada do primeiro elétron, os demais requerem energias cada vez maiores para serem deslocados do átomo. Isto porque o átomo fica mais positivo e a atração entre os elétrons mais externos, fazendo o núcleo aumentar. Neste exemplo, a diferença entre a terceira EI é muito maior que a segunda. Os dois primeiros elétrons são retirados da camada de valência (n=3), que é mais externa. Já o terceiro elétron é retirado do subnível 2***p***, de uma camada mais interna, e por isso requer maior energia.

Na tabela periódica, a relação da EI nos grupos dos elementos representativos diminui com o aumento do número atômico (diminui de cima para baixo). Quanto mais abaixo o elemento está dentro de um grupo, maior é o número de níveis, os elétrons da camada de valência estão mais distantes do núcleo e requerem menor energia para retirá-los.

Ao longo do mesmo período, a carga nuclear cresce com o aumento do número atômico e faz que seja necessária maior energia para a remoção de um elétron na camada de valência.

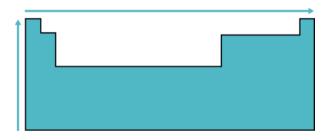



Figura 4 - Tendência da Energia de Ionização.

Afinidade eletrônica

A afinidade eletrônica (AE) é definida como a energia liberada quando um elétron é capturado por um átomo isolado, no estado gasoso, formando um íon carregado negativamente (ânion).

$$X_{(g)} + e^- \rightarrow X^-_{(g)}$$

A energia liberada apresenta valor negativo e indica a força com que o elétron está ligado ao átomo. Quanto maior a AE, mais negativo é o seu valor e maior a tendência do átomo em receber elétrons. Alguns elementos podem apresentar valores positivos de AE. Isto significa que a tendência dos átomos de receber elétrons é muito pequena, tendo que receber energia para que isto aconteça.

De modo geral, as afinidades eletrônicas diminuem — ou seja, ficam menos negativas — ao longo de uma família, pois os elétrons de valência estão gradativamente mais distantes do núcleo. Existem algumas exceções a essa tendência. Por exemplo: o flúor tem afinidade eletrônica menor que o cloro, mesmo sendo o primeiro elemento do grupo 17. Este fenômeno pode ser explicado pelo fato de o átomo de flúor ter o menor tamanho entre os elementos do grupo 17, e por isso a força de repulsão eletrônica na camada de valência é relevante.

O oitavo elétron inserido é comprimido no nível de ***n*=2**, por este ser pequeno. Neste caso, a repulsão entre os elétrons é relativamente grande, tornando menor a afinidade eletrônica do flúor.

Os halogênios (grupo 17) são os elementos com maiores afinidades eletrônicas, devido ao seu tamanho pequeno e elevada carga nuclear efetiva. Os elementos do grupo 18 (gases nobres) têm valores nulos de afinidade eletrônica.

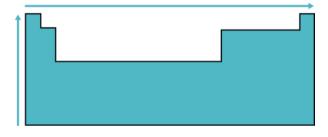



Figura 5 - Tendência da Afinidade Eletrônica.

Eletronegatividade e eletropositividade

A eletronegatividade pode ser definida como a capacidade que um átomo possui de atrair e capturar elétrons. Quando átomos estão compartilhando elétrons entre si por ligação covalente (em cada ligação covalente, os átomos compartilham um ou mais pares de elétrons), a eletronegatividade pode ser também interpretada como a força de atração que cada átomo exerce sobre esses elétrons.

Desta forma, os elétrons serão atraídos simultaneamente por ambos os núcleos, o que gera uma "disputa" pelos elétrons, que ficam mais deslocados no sentido do átomo com maior eletronegatividade.

A tendência de crescimento da eletronegatividade nos períodos acompanha o aumento da carga efetiva nuclear, ou seja, aumenta da esquerda para a direita. Os elementos do bloco dos metais de transição, entretanto, apresentam algumas irregularidades a essa regra, devido à variação do efeito de blindagem que compensa a atração do núcleo pelos elétrons de valência.

Em um mesmo grupo, a eletronegatividade decresce à medida que o número de níveis aumenta e os elétrons de valências ficam mais afastados do núcleo.

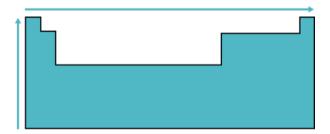



Figura 6 - Tendência da Eletronegatividade.

Se pensarmos na primeira definição apresentada para eletronegatividade, podemos então considerar a eletronegatividade como a habilidade de um átomo em atrair elétrons, tornando-se um íon negativo.

Diferentemente da eletronegatividade, a **eletropositividade** é a capacidade de um átomo de perder elétrons e formar um íon positivo (cátion). A tendência da eletropositividade é contrária àquela apresentada para a eletronegatividade. Ou seja, em um mesmo período, os elementos têm menor eletropositividade à medida que o número atômico aumenta. Ao longo do grupo, a eletropositividade aumenta quanto maior for a distância entre o núcleo e os elétrons da camada de valência.

Como os elementos mais eletropositivo são os metais, a habilidade dos átomos de perder elétrons e formar cátions pode ser denominada **caráter metálico**.

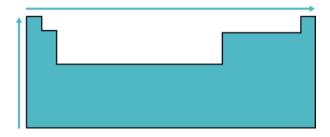



Figura 7 - Tendência da Eletropositividade.

Tamanho iônico

Vamos considerar as energias envolvidas no ganho e na perda de elétrons por um átomo e entender a tendência dos raios iônicos ao longo da tabela periódica.

Um átomo no estado fundamental é considerado neutro, pois o número de partículas positivas (prótons) é igual ao de partículas negativas (elétrons). Esta condição pode ser alterada quando um elétron é retirado ou inserido à estrutura do átomo, formando um **íon**.

O íon apresenta a carga da partícula subatômica em excesso. Isto significa que, quando são retirados elétrons de um átomo neutro, as partículas subatômicas em excesso são os prótons. Logo, assumirá carga positiva e é denominado **cátion**.

Os raios atômicos dos cátions serão sempre menores do que o raio atômico que lhe deu origem. Para explicar este fato, vamos usar como exemplo o átomo de sódio (Na). No estado elementar, um átomo de sódio possui 11 elétrons, sendo um deles alocado na camada de valência. Ao perder um elétron, a força atrativa do núcleo aumentará, pois exercerá atração apenas sobre 10 elétrons. Além disso, o cátion do sódio (Na^+) tem apenas duas camadas, pois o átomo perdeu o único elétron presente na camada ***n*=3**.

Em contrapartida, se o átomo neutro captura elétrons e estes passam a fazer parte da sua estrutura, as partículas negativas estarão em excesso e o íon formado terá carga negativa. O íon que apresenta carga negativa é definido como **ânion** e terá raio atômico maior do que do átomo neutro do qual é formado.

Para justificar esse efeito, o raciocínio é exatamente o oposto que explica a retração do raio atômico em íons positivos. A inserção de um elétron na camada de valência

de um átomo diminui a atração do núcleo sobre os elétrons. Além disso, a repulsão elétron-elétron aumenta e contribui para a expansão do raio atômico de ânions.

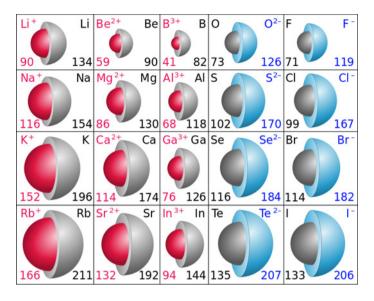



Figura 8 - Tamanho, em pm, de alguns átomos e seus íons.

Observe que íons com a mesma quantidade de elétrons (**isoeletrônicos**) possuem tamanhos distintos. Por exemplo, veja a distribuição eletrônica dos íons Na+, Mg^{+2} e F-:

Na+ (Z= 11)

$1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^0$

Raio iônico: 116

Mg^{+2} (Z= 12)

$1s^2$ $2s^2$ $2p^6$ $3s^0$

Raio iônico: 86

F- (Z= 9)

$1s^2$ $2s^2$ $2p^6$

Raio iônico: 119

Em cada caso desses exemplos, os íons possuem 10 elétrons. Entretanto, o número de prótons é do elemento pelo qual foram derivados. Quanto maior for o número de prótons, a relação entre a atração nuclear e a repulsão entre os elétrons vai favorecer a diminuição dos raios.

ATIVIDADE

1. Consulte a tabela periódica, compare os elementos Li, C e F e responda:

a) Qual deles possui o maior raio atômico?

b) Coloque em ordem crescente de eletronegatividade.

c) Qual deles tem menor eletropositividade?

2. Com relação aos raios iônicos dos elementos Ca^{+2}, Ga^{+3} e Se^{-2}, qual(is) fator(es) podem justificar as diferenças de raio iônica?

REFLEXÃO

Ao longo deste capítulo, pudemos conhecer os conceitos relacionados com o magnetismo e como este contribui para a elucidação da estrutura eletrônica do átomo. Isto porque cada elétron de um átomo é reconhecido pelo conjunto de quatro números quânticos distintos cujo número quântico de spin indica a rotação do elétron em seu próprio eixo, movimento este capaz de gerar um campo magnético ao redor.

Estudamos a configuração eletrônica dos elementos e como estas contribuem para as propriedades dos elementos e a organização da tabela periódica.

Verificamos, também, como as propriedades dos elementos — raio atômico, energia de ionização, afinidade eletrônica, eletronegatividade e eletropositividade — variam ao longo da tabela periódica.

Os conceitos estudados neste capítulo são, de fato, extremamente importantes para a construção do conhecimento relacionado aos próximos assuntos que estudaremos. Isto porque as propriedades dos elementos químicos são determinantes nos processos de transformações da matéria.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ATKINS, P.W; JONES, L. **Princípios de Química:** questionando a vida e o meio ambiente. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

BARNES, T. G. **Origem e destino do campo magnético terrestre.** Brasília: Sociedade Criacionista Brasileira, 2010. Disponível em: http://www.ipfb.org.br/ita/wp-content/

uploads/2011/10/Origem_e_Destino_Campo_Magnetico_Terrestre.pdf. Acesso em 27 de out. 2016.

BRADY J. E.; HUMISTON, G.E. **Química Geral.** 2. Ed. Vol. 1. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1986.

BROWN, T L.; H. E.; BURSTEN, B. E; BURDGE, J. R. **Química, a ciência central**, 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

KOTZ, J. C, TREICHEL, P.M.; WEAVER, G.C. **Química e Reações Químicas.** 6. ed. Vol. 1. São Paulo: Cengage Learning, 2009.

MEIJA J. et al. *Atomic weights of the elements*. **Pure Appl. Chem**.; 88, 265, 2016.

5

Ligações químicas

Ligações químicas

Introdução

A vida e tudo o que existe no universo é baseado em moléculas químicas que podem ser simples como o gás oxigênio e a água ou complexas como o DNA e proteínas essenciais para nossa sobrevivência. Basicamente, as moléculas passam a existir quando átomos de elementos iguais ou diferentes interagem entre si e as inúmeras combinações possíveis é o que viabiliza a imensa diversidade de matérias e objetos que constituem o mundo.

A descoberta do elétron e elaboração do modelo quântico atômico, foram crucias para o estabelecimento das ideias relacionadas a natureza das ligações químicas. Apesar da influência e complexidade do modelo quântico para a descrição detalhada das ligações químicas, o entendimento fundamental desses conceitos pode ser simplificado, agrupando os tipos de interações entre os elementos químicos com base nas suas propriedades.

Neste capítulo, abordaremos as classificações e características das ligações químicas e como tais interações podem determinar as propriedades físico-químicas das substâncias formadas.

OBJETIVOS

- Definir ligações químicas e suas diferenças;
- Reconhecer as estruturas de Lewis em moléculas e íons;
- Identificar a polaridade das ligações e moléculas químicas, aplicando o conceito de eletronegatividade;
- Estabelecer a configuração eletrônica dos átomos e íons.

Ligações químicas e estrutura molecular

Elétrons de valência e estrutura de lewis

Em um átomo, os elétrons envolvidos em ligações químicas, na maioria dos casos, estão localizados na camada mais externa (elétrons de valência). Esses

elétrons definem as características dos elementos. Isto porque as transformações químicas são resultado da perda, ganho ou reorganização desses elétrons.

Os elementos do grupo principal apresentam elétrons de valência em subníveis ***s*** e ***p***. Em cada grupo periódico, os elementos têm o mesmo número de elétrons de valência e, consequentemente, propriedades químicas semelhantes.

Uma maneira bastante eficiente de representarmos os elétrons na camada de valência dos elementos é pela utilização dos **símbolos de Lewis**. Neste sistema, o símbolo químico representa o núcleo do átomo e os elétrons mais internos. Os elétrons da última camada são representados por pontos distribuídos, o mais homogeneamente possível, pelos quatros lados do símbolo químico (em cima, embaixo, do lado esquerdo e do lado direito).

Para desenharmos corretamente o símbolo de Lewis para um elemento com mais de quatro elétrons de valência, devemos, primeiramente, distribuir quatro elétrons, um de cada vez, ao redor do símbolo químico. A partir daí, os demais elétrons devem ser colocados ao lado dos que já foram representados. Cada lado do símbolo pode ter no máximo dois elétrons representados, ou seja, o número máximo de elétrons na última camada é de oito elétrons, segundo este sistema.

Grupo	1	2	13	14	15	16	17	18
Configuração eletrônica da camada de valência	ns^1	ns^2	ns^2np^1	ns^2np^2	ns^2np^3	ns^2np^4	ns^2np^5	ns^2np^6
Símbolo de Lewis	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne

Tabela 1 - Exemplos de símbolo de Lewis para alguns elementos representativos.

Ligações químicas

Como já discutimos, as substâncias químicas são, fundamentalmente, formadas pela combinação entre dois ou mais átomos de elementos do mesmo tipo (substância simples) ou diferentes (substância composta).

As **ligações químicas** são interações entre os elétrons de valências entre dois átomos que ocorrem devido à redução global de sua energia potencial no estado ligado. Nesta condição, os átomos possuem maior estabilidade energética do que quando isolados.

Em geral, as ligações interatômicas mais fortes são divididas em dois tipos: **ligações iônicas** e **covalentes**.

Ligações iônicas

As ligações iônicas são caraterizadas pela transferência efetiva de um ou mais elétrons entre os átomos. Elementos com alta eletropositividade, os metais, transferem elétrons para átomos eletronegativos, os não metais. Neste processo, são formados íons positivos (cátions) e negativos (ânions).

De fato, a ligação iônica é a força de atração eletrostática entre os íons positivos e negativos que são gerados.

EXEMPLO

$$\cdot Na + :\ddot{Cl}\cdot \longrightarrow [\cdot Na + :\ddot{Cl}\cdot] \longrightarrow [Na^{+} + :\ddot{Cl}:^{-}]$$

A reação entre o sódio metálico e o cloro gasoso acontece rapidamente e gera como produto o composto iônico cloreto de sódio, no estado sólido, contendo cátions de sódio e ânions de cloreto.

$$Na_{(s)} + 1/2Cl_{2(g)} \rightarrow NaCl_{(s)}$$

Essas reações são energeticamente favoráveis, pois, como vimos no capítulo 4, os elementos metálicos possuem energia de ionização baixa e quando formam cátions alcançam a configuração eletrônica de gás nobre $(n-1)s^2(n-1)p^6$. Em contrapartida, elementos não metálicos, principalmente os mais próximos ao grupo 18, apresentam alta afinidade eletrônica. Esses elementos formam ânions e geralmente atingem a configuração do gás nobre posterior.

Os compostos iônicos são sólidos cristalinos, quebradiços e com alto ponto de fusão. Como resultado da força eletrostática que atraem os íons de carga oposta, os compostos iônicos apresentam arranjo rígido, bem definido e tridimensional.

A energia que mantém estável a estrutura de um sólido iônico é denominada **energia de rede**.

? CURIOSIDADE

Energia de rede é a energia necessária para separar completamente um mol de um composto iônico sólido em íons no estado gasoso.

Para entendermos melhor o que significa a energia de rede, imaginemos que os íons Li^+ e F^- se afastem até um momento em que não "sintam" mais a atração eletrostática entre eles, tornando-se completamente separados. Isto só seria possível se fosse aplicado ao processo energia igual ou superior a 1030 kJ/mol, correspondente à sua energia de rede.

$$LiF_{(s)} \rightarrow Li_{(g)} + F^-_{(g)} \quad \Delta H_{rede} = +1030 \text{ Kj/mol}$$

COMPOSTO	ENERGIA (KJ/MOL)
LiF	1030
LiCl	834
LiI	730
$MgCl_2$	2326
CsCl	657

Tabela 1 - Alguns exemplos de energia de rede de compostos iônicos.

Observe que os valores de energia de rede apresentados na tabela 1 são altamente positivos. Isto significa que os íons são fortemente atraídos nesses compostos. Esta grande força de atração é um dos fatores que contribuem para que os compostos iônicos sejam quebradiços e tenham alto ponto de fusão.

A energia de rede depende, além da carga dos íons, do tamanho dos átomos e da forma como se arranjam para formar o sólido. À medida que os valores das cargas opostas aumentam e que os raios atômicos diminuem, a força de atração entre os íons tende a aumentar.

Até o momento, estudamos apenas compostos formados por cátions e ânions monoatômicos, ou seja, formados por apenas um elemento que perdeu ou ganhou

elétron. Porém, diversos íons são formados por mais de um átomo, sendo denominados íons poliatômicos. Os **íons poliatômicos** são grupos de átomos que adquirem carga na formação de um composto iônico. Na Tabela 2, veremos exemplos de íons poliatômicos e suas nomenclaturas.

Nomenclatura e fórmula química de compostos iônicos

As substâncias químicas são identificadas por nomes ou fórmulas químicas. Para que os nomes atribuídos para os compostos possam seguir um padrão, um sistema é usado: a nomenclatura química. Imagine se cada uma das milhões de substâncias químicas recebessem nomes independentes!

Além da nomenclatura química, algumas substâncias receberam nomes comuns (ou tradicionais), como a água (H_2O) e a amônia (NH_3). Porém, a maioria dos compostos, a partir de um conjunto de regras, recebe nomes específicos e relacionados com suas fórmulas químicas.

Como os compostos iônicos são formados por cátions e ânions, vamos primeiramente verificar de maneira sistemática como a nomenclatura química dessas espécies é estabelecida.

Os cátions metálicos recebem o mesmo nome do elemento que deu origem a ele. Os elementos que possuem apenas um cátion possível são os metais alcalinos (+1), alcalinos terrosos (+2), íon prata (Ag^{+}) e íon zinco (Zn^{+2}).

REFLEXÃO

Ca^{+} - Íon cálcio

K^{+} - íon potássio

Al^{+3} – íon alumínio

Zn^{+2} – íon zinco

Alguns elementos metálicos podem formar cátions com diferentes cargas. Nestes casos, a carga é indicada por algarismos romanos, escritos após o nome do metal.

EXEMPLO

Fe^{+2} – íon ferro (II)

Fe^{+3} – íon ferro (III)

Au^{+1} - íon ouro (I)

Au^{+3} – íon ouro (III)

Os íons NH_4^+ e H_3O^+ são cátions não metálicos bastante comuns e recebem os nomes de íon amônio e íon hidrônio.

Diferentemente do inglês, em que os **ânions monoatômicos** e os **poliatômicos**, que não apresentam oxigênio na composição, são genericamente nomeados pelo sufixo -***ide***, em português utilizamos o sufixo -eto para a maioria deles e nomenclaturas distintas para algumas espécies em particular, como mostram os exemplos a seguir.

EXEMPLO

Cl^- - íon clor**eto**

S^{-2} – íon sulf**eto**

H^- - íon hidr**eto**

N_{-3} – íon nitr**eto**

CN^- - íon cian**eto**

NH_2^- - íon amideto

O^{-2}- íon óxido

O_2^{-2} – íon peróxido

OH^- - íon hidroxila

Chamamos de oxiânions os íons poliatômicos negativos que apresentam oxigênio em sua composição. A nomenclatura dessas espécies é designada pelos sufixos -ito ou -ato. A denominação -ito refere-se ao ânion que tem o mesmo elemento central, a mesma carga e um átomo de oxigênio a menos.

EXEMPLO

NO_3^- - íon nitr**ato**

NO_2^- - íon nitr**ito**

SO_4^{-2} – íon sulf**ato**

SO_3^{-2} – íon sulf**ito**

Em algumas situações, quando o mesmo elemento central pode formar quatro tipos de oxiânions com mesma carga, utilizamos, além dos sufixos *-ito* e *-ato*, os prefixos *-per* e *-hipo*. O prefixo *-per* é empregado quando o ânion possui mais um átomo de oxigênio em relação ao terminado em *-ato*. Já o prefixo *-hipo* indica que o oxiânion tem um oxigênio a menos que aquele terminado em *-ito*.

Vejamos o seguinte exemplo:

ClO^- - **hipo**clor**ito** **(menos um oxigênio em relação ao clorito)**

ClO_2^- - clor**ito**

ClO_3^- - clor**ato**

ClO_4^- - **per**clor**ato** **(mais um oxigênio em relação ao clorato)**

Outra situação especial que leva a nomenclaturas distintas de oxiânions é quando é possível a formação de uma nova espécie pela presença de um átomo de oxigênio. Nestes casos, acrescenta-se ao nome do oxiânion o prefixo hidrogeno ou dihidrogeno.

EXEMPLO

SO_4^{-2} – sulfato

HSO_4^- - **hidrogeno**ssulfato

PO_4^{-3} - fosfato

$H_2PO_4^-$ - dihidrogenofosfato

É importante notarmos que a presença de cada átomo de hidrogênio faz aumentar uma unidade da carga total do ânion.

? CURIOSIDADE

Alguns oxiânions contendo átomos de hidrogênio são comumente conhecidos pela inserção do prefixo -bi ao nome do ânion isento de hidrogênio.

EXEMPLO

CO_3^{-2} – íon carbonato

HCO_3^{-} – íon bicarbonato

SO_4^{-2} – íon sulfato

HSO_4^{-2} – íon bisulfato

Na Tabela 2, apresentamos exemplos de íons e suas nomenclaturas.

CARGA	FÓRMULA	NOME
+1	H^{+} Li^{+} K^{+} Na^{+} Ag^{+} Cs^{+}	Íon hidrogênio Íon lítio Íon potássio Íon sódio Íon prata Íon césio
+2	Ca^{+2} Ba^{+2} Sr^{+2} Mg^{+2} Zn^{+2} Cd^{+2} Fe^{+2}	Íon cálcio Íon bário Íon estrôncio Íon magnésio Íon zinco Íon cádmio Íon ferro (II) ou íon ferroso
+3	Al^{+3} Fe^{+3}	Íon alumínio Íon ferro (III) ou íon férrico
-1	OH^{-} CN^{-} NO_3^{-} ClO_3^{-} ClO_4^{-}	Íon hidroxila Íon cianeto Íon nitrato Íon clorato Íon perclorato

CARGA	FÓRMULA	NOME
-2	CrO_4^{-2} CO_3^{-2} SO_4^{-2}	Íon cromato Íon carbonato Íon sulfato
-3	PO_4^{-3}	Íon fosfato

Tabela 2 - Íons comuns e suas nomenclaturas.

Uma vez que compreendemos como se dá a nomenclatura dos íons, fica bastante simples designarmos os nomes dos compostos iônicos.

A estrutura básica da nomenclatura de compostos iônicos é

NOME DO ÂNION + de + NOME DO CÁTION

EXEMPLO

NaF – fluoreto de sódio

$Ca(NO_2)_2$ – nitrito de cálcio

FeO – óxido de ferro (II) ou óxido férrico

NaClO – hipoclorito de sódio

Além da nomenclatura química, os compostos podem ser identificados por suas fórmulas químicas. Se conhecemos as cargas dos íons que formam um composto iônico, facilmente conseguimos determinar sua fórmula química.

Partindo do princípio que os compostos químicos não apresentam carga, ou seja, são eletricamente neutros, podemos presumir que deve ocorrer anulação das cargas opostas dos íons. Isto significa que a carga total positiva (proveniente do cátion) é igual à carga total negativa (proveniente do ânion). Por exemplo: para formar um composto iônico a partir do Na^+ e o Cl^-, faz-se necessário apenas um átomo de cada espécie, uma vez que ambas possuem cargas idênticas. Neste caso, o composto formado é o NaCl, ou seja, o cloreto de sódio.

Já no caso do composto formado por Ba^{+2} e F^-, as cargas dos íons possuem grandezas diferentes. Sendo assim, o composto será formado por dois íons fluoretos para cada átomo de íon bário ($BaCl_2$ – cloreto de bário).

Uma maneira bastante simples que podemos empregar na construção da fórmula química é transformar a grandeza da carga (sem o sinal) de um íon no índice do seu par iônico. Quando as cargas dos íons de um composto iônico são iguais, seus índices são iguais a 1. Os índices são colocados subscritos do lado direito do elemento e indicam quantos átomos deste elemento estão presentes no composto.

EXEMPLO

Um composto formado pelo íon alumínio (Al^{+3}) e pelo íon cloreto (Cl^{-}):

$AlCl_3$

Observe que as cargas passam a ser o índice inferior do íon oposto no composto. Além disso, podemos concluir que o cloreto de alumínio é formado por três átomos de cloro e um de alumínio.

Ligações covalentes

Apesar das interessantes e peculiares características que as ligações iônicas conferem aos compostos iônicos, a maioria dos compostos químicos conhecidos não é formada por este tipo de interação atômica. Muitas substâncias que fazem parte do nosso dia a dia são líquidos, gases ou sólidos com ponto de ebulição baixo. Os átomos desses compostos certamente não estão combinados por ligações iônicas.

Outro modelo de interação entre os átomos foi proposto por G. N. Lewis, em que os átomos alcançariam a configuração eletrônica de gás nobre não por transferência, mas por compartilhamento de elétrons. Esse tipo de interação é o que conhecemos hoje por **ligações covalentes**.

? CURIOSIDADE

Ligações químicas: ligação covalente, ligação iônica e ligação metálica. Disponível em: http://qnesc.sbq.org.br/online/cadernos/04/ligacoes.pdf. Acesso em 27 de out. 2016.

A molécula de hidrogênio H_2 é o exemplo mais simples e que nos permite analisar de forma objetiva a ligação covalente. Quando átomos de hidrogênio estão próximos, dois tipos de interações eletrostáticas acontecem. Uma delas é a

repulsão entre os elétrons de cada átomo, bem como seus núcleos. A outra é a força de atração entre os núcleos e os elétrons. Se a força atrativa for superior à força de repulsão, os átomos se mantêm ligados e seus elétrons de valências passam a "orbitar" ao redor dos dois núcleos.

Experimentos de mecânica quântica mostraram que, na verdade, a ligação covalente é o resultado entre o balanceamento entre as forças de atração e repulsão entre núcleos e elétrons compartilhados, o que gera uma grande densidade eletrônica entre os núcleos e mantém os átomos unidos.

É importante destacar que, quando os átomos de hidrogênio compartilham seus elétrons, atingem a estabilidade do gás nobre hélio.

Podemos representar as ligações covalentes por meio dos símbolos de Lewis. Neste modelo, cada par de elétrons compartilhado é representado por um traço entre os átomos e os elétrons não compartilhados da última camada como pontos, distribuídos em pares, homogeneamente, ao redor do símbolo químico. Veja os exemplos a seguir:

O═C═O

Dióxido de carbono
(CO_2)

H—C≡N:

Ácido cianídrico
(HCN)

O compartilhamento de elétrons geralmente possibilita que os átomos envolvidos alcancem a configuração eletrônica de gás nobre (dois ou oito elétrons na camada de valência).

Os não metais apresentam, na camada de valência, a quantidade de elétrons referente à família periódica a que pertence. Isto nos permite prever quantos elétrons esses elementos irão compartilhar quando envolvidos, a fim de adquirir configuração eletrônica estável.

Assim, os elementos não metais que ocupam período na tabela periódica, por exemplo, tendem a formar quantidades distintas de ligações covalentes para cumprir a regra do octeto e alcançar a estabilidade eletrônica de gás nobre.

Por exemplo: os elementos carbono, nitrogênio, oxigênio e flúor tendem a fazer respectivamente 4, 3, 2 e 1 ligação covalente para adquirir a configuração eletrônica estável do neônio.

Ácido Fluorídrico (HF) — Água (H_2O) — Amônia (NH_3) — Metano (CH_4)

EXEMPLO

Determine a representação de Lewis para um composto formado por um elemento X pertencente ao grupo 14 e um elemento Y ao grupo 17 da tabela periódica.

Solução

A combinação entre esses elementos deve levar ao octeto de elétrons em torno de cada um dos átomos envolvidos. Baseado nas informações fornecidas, podemos concluir que o elemento X necessita de 4 elétrons, enquanto o elemento Y necessita de 1 elétron para completar o octeto. Quanto compartilhado um par de elétron entre um átomo de cada elemento, observa-se a estabilização apenas do átomo do elemento Y.

Sendo assim, o elemento X deve compartilhar um elétron com 4 átomos do elemento Y, como mostra a estrutura de Lewis resultante.

Ligações covalentes múltiplas

Quando apenas um par de elétrons é compartilhado entre dois átomos, a ligação covalente formada é denominada **ligação simples**. É possível que o octeto seja alcançado quando é compartilhado mais de um par de elétrons.

Quando existe o compartilhamento de dois e três pares de elétrons, as ligações covalentes são chamadas, respectivamente, de **ligação dupla** e **ligação tripla**. Geralmente a distância entre os átomos diminui à medida que aumenta o número de elétrons compartilhados.

EXEMPLO

O═C═O

Dióxido de carbono
(CO_2)

H—C≡N:

Ácido cianídrico
(HCN)

Polaridade de ligações químicas

O compartilhamento de elétrons entre átomos do mesmo tipo deve ser homogêneo, como acontece com as moléculas de H_2, Cl_2, N_2, por exemplo. Porém, em ligações covalentes entre elementos diferentes, os elétrons compartilhados são atraídos mais fortemente pelo núcleo de um dos elementos. Este comportamento leva ao conceito de **polaridade de ligação**, que auxilia na descrição do compartilhamento de elétrons e classificação da ligação a partir disso.

A ligação que conta com compartilhamento homogêneo de elétrons é denominada **ligação apolar**. Elas acontecem, por exemplo, em átomos do mesmo tipo de elemento, como nos exemplos citados anteriormente.

As ligações são consideradas **polares** quando elétrons são compartilhados por elementos diferentes e, consequentemente, com capacidades distintas de atrair esses elétrons.

Se esta capacidade de atração eletrônica de um dos átomos for forte o suficiente para "arrancar" elétrons de outro átomo, a interação resultante entre eles é uma ligação iônica. Mas como podemos estimar se uma ligação terá caráter covalente polar, covalente apolar ou iônica?

No capítulo 4, estudamos algumas propriedades periódicas dos elementos, entre elas a eletronegatividade. Numericamente, a **eletronegatividade** dos elementos pode ser estimada pela variedade de suas propriedades, entre elas a energia de ionização e a afinidade eletrônica.

A partir dessas observações, Linus Pauling (1901-1994) desenvolveu uma escala de eletronegatividade e atribuiu valores numéricos (sem unidades) para os elementos químicos. O elemento de menor eletronegatividade, por exemplo, é o césio (eletronegatividade 0,7), e o de maior eletronegatividade, o flúor (eletronegatividade 4,0).

Os valores de eletronegatividade dos elementos envolvidos em uma ligação química podem ser usados para medir a polaridade da ligação. Observe os exemplos a seguir:

COMPOSTO	H^2	HCl	NaCl
DIFERENÇA DE ELETRONEGATIVIDADE	2,1 – 2,1 = 0	3,0-2,1 = 0,9	4,0-0,9 = 3,1
TIPO DE LIGAÇÃO	Covalente Apolar	Covalente Polar	Iônica

* valores de eletronegatividade: H = 2,1; Cl = 3,0; Na = 0,9

Na molécula H_2, os elétrons são compartilhados homogeneamente. Logo, constitui-se uma ligação covalente apolar. Já na molécula de HCl, o cloro apresenta maior eletronegatividade, o que leva à distribuição desigual de densidade eletrônica entre os átomos. Neste caso, o cloro exerce maior atração sobre os pares de elétrons compartilhados por ser mais eletronegativo. Desta forma, eles tendem a se afastar do átomo de hidrogênio, e a densidade eletrônica em torno do seu núcleo é deslocada no sentido do núcleo do cloro.

Como consequência, o átomo do elemento menos eletronegativo assume uma carga parcial positiva, enquanto o átomo do elemento mais eletronegativo assume uma carga parcial negativa. **Quanto maior for a diferença de eletronegatividade entre os átomos, mais polares serão suas ligações.**

$$\overset{\delta+}{H}-\overset{\delta-}{Cl}$$

Os símbolos $\delta+$ e $\delta-$ indicam cargas parciais positiva e negativa, respectivamente. A exemplo do HCl, quando em uma molécula que possui centros de cargas negativas e positivas que não coincidem são denominadas **moléculas polares**.

A polaridade de uma molécula é um importante fator para determinar as propriedades dos compostos em nível macro ou microscópico. Isto porque as moléculas de substâncias polares se organizam em relação umas às outras: a parte positiva de uma molécula é atraída pela parte negativa da outra. Tais interações

determinam propriedades importantes da matéria como ponto de fusão, ponto de ebulição e solubilidade.

Nomeclatura de compostos moleculares

Para nomear substâncias não iônicas (moleculares) compostas por dois tipos de elementos (compostos binários), utilizamos, a princípio, regras semelhantes àquelas aplicadas para os compostos iônicos.

Primeiramente nomeia-se o elemento mais eletronegativo inserindo o sufixo -eto seguido da preposição de e o nome do elemento menos eletronegativo. Além disso, geralmente utilizam-se prefixos gregos para indicar a quantidade de átomos de cada elemento (**Tabela 3**). Uma exceção que devemos destacar é quando o elemento eletronegativo é o oxigênio. Neste caso, no lugar da inclusão do sufixo -eto ao nome do elemento, utiliza-se o termo **óxido**.

EXEMPLO

H_2S – sufeto de diidrogênio

OF_2 – difluoreto de oxigênio

Cl_2O_3 – trióxido de dicloro

PREFIXO	NÚMERO
+1	
Mono	1
Di	2
Tri	3
Tetra	4
Penta	5
Hexa	6
hepta	7

PREFIXO	NÚMERO
Octa	8
Nona	9
Deca	10

Tabela 3 - Prefixos de origem grega utilizados para indicar quantidades de átomos de cada elemento em compostos binários moleculares.

Estrutura de lewis para compostos moleculares

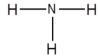
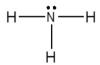
Desenhar a estrutura de Lewis para compostos moleculares é bastante útil para entendermos suas ligações químicas e, por consequência, suas propriedades químicas. Via de regra, a construção das estruturas de Lewis segue as seguintes etapas:

1. Somar os elétrons de valência. No caso de íons, adicionamos um elétron para a carga negativa se for um ânion, e subtraímos um elétron para cada carga positiva se for um cátion. Esses elétrons serão distribuídos entre os átomos como ligações covalentes ou elétrons não ligados, a fim de completar o octeto em cada um deles;
2. Escrever os símbolos dos elementos, a fim de indicar quais átomos estão ligados entre si. Entre esses átomos, colocamos uma ligação simples. Geralmente as fórmulas químicas de compostos moleculares ou íons são escritas na ordem em que os elementos estão ligados. Quando temos um átomo central ligado a outros grupos, este é escrito primeiro, como por exemplo NH_3. Os símbolos químicos destes grupos devem ser distribuídos de forma simétrica ao redor do átomo central;
3. Completar o octeto dos átomos ligados ao átomo central através de ligações covalentes com outros átomos. Os elétrons que porventura sobrarem serão colocados sobre o átomo central, mesmo que isto resulte em quantidade de elétrons superior ao octeto;
4. No caso de não ser possível completar o octeto do átomo central, devem ser contruídas ligações múltiplas.

EXEMPLO

1) Construa a estrutura de Lewis para a molécula de amônia (NH3).

Solução

- Somar o número total de elétrons de valência: o nitrogênio pertence ao grupo 15 (5 elétrons de valência), enquanto o hidrogênio apresenta 1 elétron de valência. O total de elétrons de valência é: 5 + (3x1)= 8.
- Escrever o símbolo dos elementos, distribuindo simetricamente os átomos de hidrogênio em torno do símbolo do nitrogênio e ligando-os ao nitrogênio por ligações covalentes simples.

- Completar o octeto dos átomos periféricos;
- Por fim, colocar os elétrons restantes sobre o átomo central.

Construa a estrutura de Lewis para a molécula de ácido cianídrico (HCN):

Solução

- Somatório de elétrons de valência:

  H – 1 elétron de valência

  C – Pertence ao grupo 14 (ou família 4 A), logo possui 4 elétrons de valência

  N - Pertence ao grupo 15 (ou família 5 A), logo possui 5 elétrons de valência.

  A quantidade total de elétrons no nível de valência é: 1 + 4 + 5 = 10.

- Escrever os símbolos dos elementos e ligar os átomos periféricos ao átomo central por ligações simples.

Como o hidrogênio tem um elétron de valênica, suporta apenas uma ligação simples. Desta forma, o hidrogênio, apesar de ser menos eletronegativo que o carbono e o nitrogênio, não pode ser o átomo central. O átomo central será o carbono, uma vez que sua eletronegatividade é menor que a do nitrogênio.

H—C—N

- Completar o octeto dos átomos ligados ao elemento central.

Cada ligação covalente é equivalente a dois elétrons. Assim, restam 6 elétrons a serem distribuídos a fim de completar o octeto do átomo de nitrogênio.

H—C—N:

Ao fim da distribuição, é possível constatar que o octeto do átomo central não foi completado. Neste caso, a estabilidade do octeto do átomo central é alcançada utilizando-se pares de elétrons não compartilhados do nitrogênio para formar uma ligação tripla.

H—C—N: H—C≡N:

3) Construa a estrutura de Lewis para o íon ClO2-

Solução:

O cloro pertence ao grupo 17 (ou família 7 A) e o oxigênio ao grupo 16 (ou 6 A). Como se trata de um ânion, devemos adicionar ao somatório dos elétrons de valência um elétron, referente a sua carga. No total, teremos 7 + (2 x 6) + 1 = 20 elétrons.

No caso de oxiânions, os átomos de oxigênio se posicionam ao redor do átomo central não metálico.

O—Cl—O

Após a distribuição completar o octeto de todos os átomos, os quatro elétrons restantes são colocados sobre o átomo central.

[:O—Cl—O:] -2

Repare que, para íons, as representações de Lewis são escritas dentro de colchetes e a carga é escrita no canto superior direito.

Carga formal

A estrutura de Lewis representa como os elétrons de valência estão distribuídos em um íon ou molécula, de forma a obedecer a regra do octeto. Entretanto, em algumas situações, várias combinações satisfazem a regra do octeto. Precisamos,

então, buscar aquela que seja mais razoável. Uma maneira possível para isto é determinar a carga formal de cada átomo presente no composto molecular.

Entendemos como carga formal a carga que o átomo assumiria se a eletronegatividade de todos os demais átomos da molécula fosse igual. Geralmente, quando várias representações de Lewis para uma molécula são possíveis, a que possui mais estabilidade é aquela em que:

(i) Os átomos possuem cargas formais bem próximas de zero;
(ii) As cargas negativas se localizam sobre os átomos mais eletronegativos.

O cálculo da carga formal deve levar em conta a distribuição dos elétrons aos átomos da seguinte forma:

(i) Todos os elétrons não ligados são atribuídos aos átomos onde estão agrupados;
(ii) Para ligações covalentes, metade dos elétrons é distribuída para cada átomo envolvido na ligação.

A carga formal é determinada pela diferença entre os elétrons de valência do átomo isolado e os elétrons distribuídos na estrutura de Lewis. Observe, por exemplo, a determinação da carga formal do carbono e do nitrogênio no íon cianeto, CN^-:

$$\left[:C \equiv N: \right]^-$$

O átomo de carbono tem dois elétrons não ligados e faz três ligações covalentes com o nitrogênio. Logo, são atribuídos para esse átomo 5 elétrons (2 não ligados e 3 envolvidos nas ligações covalentes). O número de elétrons de valência do carbono isolado é 4 (lembre-se que ele pertence ao grupo 14). Logo, a carga formal do carbono nessa molécula é 4 - 5 = -1.

Ao átomo nitrogênio também são atribuídos 5 elétrons, pois ele possui 2 elétrons não ligados e 3 elétrons envolvidos em ligações covalentes. A carga formal do nitrogênio é 5 - 5 = 0.

$$[:\overset{-1}{C}\equiv\overset{0}{N}:]^-$$

Observe que o somatório das cargas formais de todos os átomos do cianeto é igual à carga do íon. No caso de compostos moleculares, esse somatório deve ser igual a zero.

Vejamos outros exemplos:

1) Determine a estrutura de Lewis mais provável para o composto CO_2.

Solução

Obedecendo às regras para a construção da estrutura de Lewis, temos duas possibilidades:

MEIO	$O=C=O$			$:O-C\equiv O:$		
ELÉTRONS DE VALÊNCIA	6	4	6	6	4	6
ELÉTRONS ATRIBUÍDOS	6	4	6	7	4	5
CARGA FORMAL	0	0	0	-1	0	+1

Por se tratar de uma molécula neutra, o somatório das cargas formais é igual a zero nas duas estruturas. Na primeira estrutura, as cargas formais dos elementos é nula, sendo esta a mais estável.

1) Determine a estrutura de Lewis mais provável para o íon tiocianato (SCN^-)

Solução

Podemos construir três possibilidades de estrutura para o íon SCN^-:

$$[:\overset{+1}{S}\equiv\overset{0}{C}-\overset{-2}{N}:]^- \qquad [\overset{0}{S}=\overset{0}{C}=\overset{-1}{N}]^- \qquad [:\overset{-1}{S}-\overset{0}{C}\equiv\overset{0}{N}:]^-$$

Como já vimos, embora os somatórios de carga formal de todas as estruturas sejam iguais à carga do ânion (-1), a segunda estrutura é a mais viável, pois a carga negativa está no nitrogênio, que é o elemento mais eletronegativo.

COMENTÁRIO

Apesar de importantes na determinação da estrutura de Lewis, as cargas formais **não** representam a carga real dos átomos em uma molécula e íons. A distribuição real das cargas é determinada principalmente pela diferença de eletronegatividade dos átomos.

Efeito de ressonância

Podemos considerar a estrutura de Lewis como um esquema da distribuição dos elétrons de valência na molécula. Em algumas situações, entretanto, não é possível representar uma molécula (ou íon) por apenas uma estrutura de Lewis. Uma espécie química que exemplifica claramente esta situação é a molécula de ozônio. Aplicando as regras para a determinação da estrutura de Lewis do ozônio, duas representações são possíveis: uma com a dupla ligação à direita e outra com a dupla ligação à esquerda.

Ambos os casos seriam válidos. Entretanto, experimentalmente, pode-se constatar que as ligações O-O do ozônio são equivalentes. Lembre-se que uma ligação dupla tende a ser mais curta e mais forte que uma ligação simples.

Na molécula de ozônio, evidências experimentais mostraram que a força de comprimento das ligações O-O é maior quando comparada a uma ligação simples e menor quando comparada a uma ligação dupla. Desta forma, uma única estrutura de Lewis não consegue descrever adequadamente o arranjo do elétrons na molécula.

Quando mais de uma estrutura de Lewis pode ser representada para uma mesma espécie e as propriedades das ligações covalentes são intermediárias entre ligações simples e múltiplas, essas formas devem ser desenhadas em sequências, intercaladas por setas com duas pontas. Cada estrutura de Lewis, nesses casos, representa um híbrido de ressonância.

Essa representação indica que o arranjo mais aceitável é a mistura das estruturas possíveis. Isto não significa que a molécula mude constantemente sua

estrutura. Na verdade, as duas formas coexistem de forma inseparável, e essa "mistura" é primordial para as propriedades da substância.

Uma forma bem simples de entender o fenômeno de ressonância é quando a comparamos com a mistura de cores. Ao misturarmos uma tinta azul e outra amarela, teremos a formação de uma tinta de cor verde. A tinta verde tem suas próprias características, diferentes das tintas azul e amarela separadamente. Além disso, a cor observada é sempre verde e não oscila entre as cores das tintas originais.

Consideremos agora o íon nitrato (NO_3^-). Podemos estabelecer três estruturas de Lewis possíveis:

A distribuição dos elétrons é diferente, porém os átomos estão arranjados da mesma maneira nas estruturas. Todas as formas descrevem de forma aceitável a estrutura de Lewis para o íon, e as ligações N-O possuem distâncias iguais.

Exceções ao octeto

Apesar da simplicidade da regra do octeto para grande parte dos elementos químicos, em algumas situações envolvendo ligações covalentes ela não pode ser aplicada. De forma geral, existem três situações em que esta regra não é obedecida:

a) Moléculas deficientes de elétrons (presença de um elemento com menos de um octeto);

b) Moléculas com expansão do octeto (presença de um elemento que comporta mais de um octeto);

c) Moléculas com número ímpar de elétrons.

Compostos formados por átomo que possui menos de um octeto

Esse tipo de exceção acontece quando um átomo em determinado composto ou íon apresenta número de elétrons inferior a um octeto. Os principais

compostos nos quais essa exceção se enquadra são aqueles que contêm átomos de boro ou berílio. Vejamos o exemplo de estrutura de Lewis do BF_3:

O átomo de boro faz três ligações covalentes simples com os átomos de flúor, contando, assim, com seis elétrons a sua volta. Nesta representação, a carga formal de todos os átomos é nula.

Ainda que tentemos completar o octeto do boro por meio de ligações duplas, as estruturas de ressonâncias formadas são menos importantes, uma vez que as cargas formais são desfavoráveis. Observe que o átomo de boro, que é menos eletronegativo que o flúor, assume carga formal negativa, enquanto o flúor apresenta carga formal positiva.

O trifluoreto de boro é bastante reativo frente a moléculas capazes de "doar" pares de elétrons, como a amônia.

O complexo formado pela reação entre BF_3 e NH_3 é estável, e nele o boro alcança o octeto eletrônico.

Compostos formados por átomo que possui octeto expandido

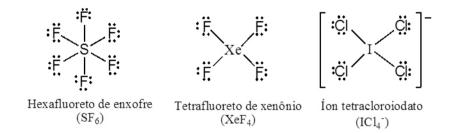
Entende-se por compostos (ou íons) com octeto estendido aqueles que possuem átomo com mais de oito elétrons na camada de valência, como por exemplo o PCl_5.

A estrutura de Lewis para o PCl_5 mostra que existem 10 elétrons de valência ao redor do átomo de fósforo.

A expansão do nível de valência apenas é observada com elementos a partir do terceiro período da tabela periódica. Isto porque elementos com 3 ou mais níveis energéticos possuem orbitais do tipoo ***s***, ***p*** e ***d*** desocupados, que podem participar das ligações.

Outro fator que contribui para a expansão do nível de valência é o tamanho do átomo. Quanto maior for o átomo central, maior o número de átomos que podem se ligar a ele. Estes átomos, por sua vez, facilitam a interação com o átomo central quanto menores e mais eletronegativos forem, como F e Cl.

Observe a seguir outros exemplos de compostos com octeto expandido:

Hexafluoreto de enxofre (SF_6) — Tetrafluoreto de xenônio (XeF_4) — Íon tetracloroiodato (ICl_4^-)

Compostos com número ímpar de elétrons

O último caso de exceções à regra do octeto que veremos ocorre em alguns poucos casos, quando não é possível o total de emparelhamento dos elétrons e o octeto em torno de todos os átomos da molécula. O dióxido de nitrogênio (NO_2) é um exemplo dessa situação.

Somando-se os elétrons de valência do NO_2, temos um total de 17 elétrons (5 elétrons de valência do nitrogênio e 6 elétrons de cada átomo de oxigênio). Observe a seguir as estruturas de Lewis mais relevantes para esse composto:

$$O-N=O \longleftrightarrow O=N-O$$

Outros exemplos de moléculas que não cumprem a regra do octeto por apresentar número ímpar de elétrons são o NO e ClO_2.

ATIVIDADE

1. Há alguns anos, uma “chupeta anticárie” foi lançada no mercado a fim de auxiliar na saúde bucal de bebês. Na composição desse produto encontramos o fluoreto de sódio (o flúor é amplamente utilizado como agente anticárie) e um açúcar que não causa cárie, o xilitol ($C_5H_{12}O_5$). Indique os tipos de ligação química (iônica ou covalente) encontradas no fluoreto de sódio (NaF) e no xilitol. Justifique sua resposta.

2. O cianato (NCO^-) e o fulminato (CNO^-) são íons com mesma fórmula molecular, porém se diferenciam pelo arranjo dos átomos. No íon cianeto, o átomo central é o carbono, enquanto no fulminato (mais instável), o nitrogênio encontra-se no centro da molécula. Baseado nessas informações, resolva as questões abaixo:

a) Determine as possíveis estruturas de Lewis para ambos os íons.

b) Com base nas cargas formais, indique qual é a estrutura de Lewis apresentada com a distribuição de cargas mais aceitável. Justifique.

REFLEXÃO

Neste capítulo, estudamos a formação das ligações químicas e as propriedades dos elementos que influenciam essas interações. A partir deste conhecimento, foi possível conhecer os dois grandes grupos de ligações químicas, classificados como **ligações iônicas** e **ligações covalentes**.

Vimos que as ligações iônicas consistem na transferência efetiva de elétrons entre elementos metálicos (doam elétrons e formam cátions) e não metálicos (recebem elétrons e formam ânions) que apresentam elevada diferença de eletronegatividade. As substâncias formadas por este tipo de ligação são denominadas compostos iônicos. Essas substâncias encontram-se naturalmente no estado sólido e cristalino, possuindo alto ponto de fusão, entre outras características. Alguns importantes compostos iônicos inorgânicos são utilizados para fins terapêuticos, como o $NaHCO_3$ (bicarbonato de sódio) e o $Mg(OH)_2$ (hidróxido de magnésio), ambos indicados para o tratamento de acidez estomacal.

As ligações covalentes são formadas pelo compartilhamento de elétrons entre átomos de elementos não metálicos. Podemos ilustrar as ligações e a distribuição dos elétrons no composto a partir de estruturas de Lewis. Os elementos podem compartilhar um (ligação simples), dois (ligação dupla) ou três (ligação tripla) pares de elétrons. Os elétrons compartilhados podem ou não estar compartilhados de maneira igual. Em se tratando de elementos idênticos, os elétrons envolvidos na ligação são atraídos com a mesma força pelos núcleos – ligação apolar. No caso de elementos diferentes, aquele com maior eletronegatividade atrairá os elétrons com maior força, mantendo sobre si maior densidade eletrônica – ligação polar.

Os conceitos que envolvem a formação das ligações químicas são extremamente importantes para compreendermos as propriedades dos compostos originários dessas interações e suas possíveis transformações. Desta forma, é fundamental que tenhamos o domínio sólido deste conhecimento para que, além de entendermos o comportamento físico-químico de diferentes substâncias, possamos empregá-lo no desenvolvimento de atividades rotineiras e na solução de problemas no âmbito químico-farmacêutico.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ATKINS, P.W; JONES, L. **Princípios de Química:** questionando a vida e o meio ambiente. 5. ed. Porto Alegre: Bookman, 2001.

BRADY J. E.; HUMISTON, G.E. **Química Geral.** 2. Ed. Vol. 1. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 1986.

BROWN, T L.; H. E.; BURSTEN, B. E; BURDGE, J. R. **Química, a ciência central.** 9. ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

KOTZ, J. C, TREICHEL, P.M.; WEAVER, G.C. **Química e Reações Químicas**. 6. ed. Vol. 1. São Paulo: Cengage Learning, 2009.